



Escola Universitària d'Enginyeria  
Tècnica Industrial de Barcelona  
Consorci Escola Industrial de Barcelona

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

**Volum I**  
Memòria

TREBALL DE FI DE GRAU

A background image of a large, ornate building with a central tower and many windows, likely a university building.

# **"TRACTAMENT DE CONTAMINANTS EMERGENTS AMB PROCESSOS D'OXIDACIÓ AVANÇADA"**

TFG presentat per obtenir el títol de GRAU en  
ENGINYERIA QUÍMICA

Per Ester Parellada Torcal

Barcelona, 09 de Juny de 2015

Director: Montserrat Pérez Moya  
Departament de 713 (EQ)  
Universitat Politècnica de Catalunya (UPC)

# ÍNDEX MEMÒRIA

Índex memòria.....	- 1 -
Resum.....	- 4 -
Resumen .....	- 5 -
Abstract .....	- 6 -
Agraïments .....	- 7 -
<b>Capítol 1: INTRODUCCIÓ .....</b>	<b>- 9 -</b>
1.1. Motivació.....	- 10 -
1.3. Etapes del projecte .....	- 11 -
1.4. Contaminant .....	- 12 -
1.4.1. Mecanisme d'acció .....	- 13 -
1.4.2. Propietats fisico-químiques .....	- 14 -
1.5. Processos d'oxidació avançada (AOP's).....	- 15 -
1.5.1. Reacció Fenton.....	- 16 -
1.5.2. Reacció Foto-Fenton .....	- 17 -
1.6. Estat de l'art .....	- 18 -
<b>Capítol 2: MÈTODES ANALÍTICS.....</b>	<b>- 21 -</b>
2.1. Determinació de TOC .....	- 22 -
2.2. Determinació de H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> per espectrofotometria.....	- 26 -
2.3. Mesures online .....	- 28 -
<b>Capítol 3: MÈTODE EXPERIMENTAL.....</b>	<b>- 31 -</b>
3.1. Condicions de treball.....	- 32 -
3.2. Esquema experimental .....	- 36 -
3.4. Seguretat i medi ambient .....	- 40 -
3.5. Marc legal.....	- 42 -
<b>Capítol 4: RESULTATS EXPERIMENTALS.....</b>	<b>- 43 -</b>
4.1. Experiments preliminars .....	- 44 -
4.2. Variacions.....	- 47 -
4.2.1. Paracetamol constant a 40ppm .....	- 49 -
4.2.2. Paracetamol constant a 20ppm .....	- 50 -
4.2.3. Paracetamol constant a 60ppm .....	- 51 -
4.2.4. Peròxid constant a 189ppm.....	- 52 -
4.2.5. Peròxid constant a 378ppm.....	- 53 -
4.2.6. Peròxid constant a 567ppm.....	- 54 -

4.3.	Estudi de ratis .....	- 55 -
4.4.	Anàlisi estadístic .....	- 57 -
4.4.1.	Gràfic Pareto d'efectes estandarditzats .....	- 57 -
4.5.	Variables online .....	- 60 -
<b>Capítol 5: AVALUACIÓ ECONÒMICA .....</b>		<b>- 63 -</b>
5.1.	Costos materials .....	- 64 -
5.2.	Costos energètics .....	- 66 -
5.3.	Costos personals .....	- 67 -
5.4.	Amortitzacions .....	- 68 -
<b>Capítol 6: CONCLUSIONS .....</b>		<b>- 71 -</b>
6.1.	Conclusions del projecte .....	- 72 -
6.2.	Propostes de millora .....	- 73 -
<b>Capítol 7: BIBLIOGRAFIA .....</b>		<b>- 75 -</b>
7.1.	Referències bibliogràfiques .....	- 76 -
7.2.	Bibliografia de recerca .....	- 77 -

## **ÍNDEX ANNEX**

1. Recta calibratge Peròxid .....	-79-
2. Rectes de calibratge del TOC i l'aigua destil·lada.....	-80-
3. Valors experimentals.....	-84-
4. Fitxes de seguretat .....	-88-
4.1. Paracetamol.....	-88-
4.2. Peròxid d'hidrogen.....	-92-
4.3. Sulfat de ferro (II).....	-100-
4.4. Vanadat amònic .....	-103-
4.5. Hidròxid de sodi .....	-107-
4.6. Àcid clorhídric .....	-109-

## **RESUM**

Durant els darrers anys s'ha observat un augment dels contaminants emergents en l'atmosfera i en l'aigua, sobretot d'aquells no procedents de l'activitat industrial sinó del l'ús quotidià i que per tant, no estan inclosos en les legislacions ambientals. Els fàrmacs en són un bon exemple i és per això que s'ha escollit el paracetamol (PCT) com a objecte d'estudi d'aquest projecte.

En vista d'aquest problema, s'estudia la degradació del PCT mitjançant processos d'oxidació avançada, Fenton i Foto-Fenton, adequats pel tractament de compostos orgànics. Per demostrar-ne la seva eficàcia es realitzen un seguit d'experiments amb una planta pilot automatitzada. El seguiment de l'evolució dels mateixos es realitza mitjançant l'anàlisi del carboni orgànic total (TOC) de l'aigua, el consum del peròxid d'hidrogen per espectrofotometria. Mitjançant el disseny d'experiments s'estudia l'efecte de la dosi del contaminant i del peròxid d'hidrogen sobre el sistema d'estudi. El seguiment del TOC (contaminant i els seus intermedis de reacció) evidencia que la degradació del PCT és altament dependent de la càrrega del  $H_2O_2$ . L'estudi del rati  $H_2O_2$ :PCT permet especificar quines són les dosis que obtenen un major rendiment.

Per últim, es confirmen les conclusions qualitatives obtingudes a l'estudi, mitjançant l'anàlisi estadístic del disseny d'experiments.

## **RESUMEN**

Durante los últimos años se ha observado un aumento de los contaminantes emergentes en la atmósfera y en el agua, sobre todo de aquellos no procedentes de la actividad industrial sino del uso cotidiano y por tanto, no son considerados en las legislaciones ambientales. Los fármacos son un buen ejemplo y es por ello que se ha escogido el paracetamol (PCT) como objeto de estudio de este proyecto.

En vista de este problema, se estudia la degradación del PCT mediante procesos de oxidación avanzada, Fenton y Foto-Fenton, adecuados para el tratamiento de compuestos orgánicos. Para demostrar su eficacia se realizan una serie de experimentos con una planta piloto automatizada. El seguimiento de la evolución de los mismos se realiza mediante el análisis del carbono orgánico total (TOC) del agua y el consumo del peróxido de hidrógeno por espectrofotometría. Mediante el diseño experimental se estudia el efecto de la dosis del contaminante y la del peróxido de hidrógeno sobre el sistema de estudio. El seguimiento del TOC (contaminante y sus intermedios de reacción) evidencian que la degradación del PCT es altamente dependiente de la carga del  $H_2O_2$ . El estudio de ratios  $H_2O_2$ :PCT permite especificar qué dosis obtienen un mayor rendimiento.

Por último, se confirman las conclusiones cualitativas obtenidas en el estudio, mediante el análisis estadístico del diseño experimental.

## **ABSTRACT**

In recent years there has been an increase of emerging contaminants in the atmosphere and water, specially of these one are not from the industrial activity but from everyday use and therefore are not considered in environmental laws. Drugs are a good example and that is why we have chosen paracetamol (PCT) as an object of study for this project.

In view of this problem, we study the degradation of PCT by advanced oxidation processes, Fenton and photo-Fenton, suitable for the treatment of organic compounds. To demonstrate their efficacy we executed a number of experiments with an automated pilot plant. The evolution of the same is determined by analyzing total organic carbon (TOC) of water and consumption of hydrogen peroxide by spectrophotometry. By experimental design we study the contaminant dose effects and hydrogen peroxide on the system of study. Monitoring the TOC (contaminant and reaction intermediates) show that the degradation of PCT is highly dependent on the load of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. The ratio study H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>:PCT lets you specify which dose get higher performance.

Finally, qualitative conclusions of the study are confirmed by the statistical analysis of experimental design.

## **AGRAÏMENTS**

Gràcies a totes aquelles persones que durant el transcurs d'aquest projecte han confiat en mi i m'han donat suport en tot moment. Sobretot a la meua família, i entre ells destacar als meus pares, pels ànims i l'empenta que em donen. És una sort tenir-los, perquè m'ajuden a millorar i a ser millor persona en el dia a dia.

M'agradaria també donar les gràcies a la meua tutora, la Montserrat, i a la Francesca, que sempre s'han mostrat disposades a ajudar i col·laborar en tot, resolent tots els dubtes que han anat sorgint.

Per últim, a tots aquells que han format part d'aquesta etapa a l'EUETIB, que després de tots aquests anys es trobarà a faltar.





# **CAPÍTOL 1: INTRODUCCIÓ**

## 1.1. Motivació

L'aigua és un recurs natural que ens ofereix el nostre planeta i sense el qual seria impossible la nostra existència. Quotidianament la utilitzem per múltiples tasques però cal ser conscient que és un bé escàs i és important no malgastar-la ni contaminar-la, no només per la conservació del medi natural sinó també per la salut de l'ésser humà.

Des de ja fa uns anys existeixen nombroses tècniques per depurar-la i tractar-la evitant que els residus i compostos químics provinents de l'activitat industrial s'aboquin al mar, fet regulat per ordenances municipals i estatals sobre la qualitat de l'aigua. Però darrerament s'ha observat un augment de contaminants emergents, tots aquells compostos fruit de l'activitat humana en el dia a dia que acaben a les aigües residuals com: fàrmacs, plastificants de les ampolles, antioxidants, desinfectants, drogues d'abús... L'acumulació d'aquests productes no se sap encara fins a quin punt poden arribar a perjudicar-nos però per aquest motiu s'investiga la viabilitat de certes tècniques per eradicar-los. Una de les més utilitzades són els processos d'oxidació avançada (PAO's), adients per l'eliminació de compostos orgànics. Són mètodes químics o fotoquímics que poden combinar-se entre ells i que gràcies a la formació de radicals lliures tenen un gran poder oxidant per degradar. Els més coneguts utilitzen  $H_2O_2$ ,  $O_3$  o radiació ultraviolada, entre d'altres, i pel fet d'utilitzar aquests reactius i requerir un consum energètic solen ser costosos i utilitzar-se en experiments de petita o mitjana escala.

## 1.2. Objectius

Els objectius a assolir en aquest projecte són:

- ✓ Conèixer i verificar el funcionament de la planta pilot: equip hidràulic, instrumentació, monitorització, etc.
- ✓ Posada a punt (rectes de calibratge) dels mètodes analítics de l'analitzador de TOC i espectrofotòmetre.

- ✓ Determinar una metodologia de treball per realitzar els experiments.
- ✓ Estudiar la viabilitat de la degradació del paracetamol mitjançant els mètodes d'oxidació avançada Fenton i foto-Fenton.
- ✓ Comparar els resultats obtinguts de la reacció Fenton amb la foto-Fenton.
- ✓ Escollir a partir de l'estudi preliminar els factors i els nivells als que es realitzarà el disseny d'experiments.
- ✓ Estudiar l'efecte del rati  $H_2O_2$ :PCT en la degradació del contaminant i els seus intermedis de reacció mitjançant el disseny d'experiments.
- ✓ Analitzar que les dades experimentals obtingudes siguin coherents i fiables i fer les repliques necessàries.
- ✓ Verificar les conclusions qualitatives obtingudes a l'estudi, mitjançant l'anàlisi estadístic del disseny d'experiments.
  - Determinar les variables influents del procés.
  - Proposar un model empíric.
- ✓ Estudiar la viabilitat econòmica del projecte.

### 1.3. Etapes del projecte

El projecte es desenvolupa en les etapes descrites a continuació:

- Introducció: es detallen els objectius, es desenvolupa el fonament teòric començant per les característiques del contaminant utilitzat, el paracetamol, i seguint pels processos d'oxidació avançada.
- Mètodes analítics i experimentals: s'expliquen els aparells i el material que s'emptra al llarg del projecte. Es plantegen els diferents blancs i experiments que es duen a terme i per quins motius.
- Resultats experimentals: s'analitzen les dades obtingudes durant la realització dels experiments, es presenten els gràfics necessaris i s'avaluen els resultats.
- Avaluació econòmica: es detalla el cost total del projecte incloent els costos dels reactius, energètics, materials i personals.
- Conclusions: es detallen les conclusions obtingudes dels experiments, les comparacions adients entre aquests, si s'han aconseguit els objectius plantejats o si caldria fer-ne alguna variació.

- Annexos: s'adjunten els Procediments Normalitzats de Treball de la planta pilot, del espectrofotòmetre UV-Visible i del analitzador de TOC. També inclou les dades recollides per l'Scada.

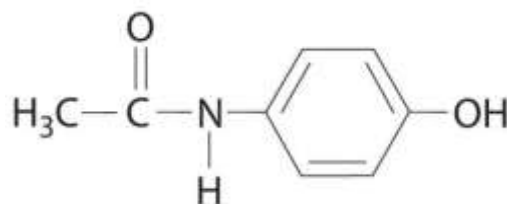
## 1.4. Contaminant

L'acetaminofèn, conegut amb el nom de paracetamol, és un compost químic utilitzat com a fàrmac per les seves propietats analgèsiques i antipirètiques.

Els primers estudis que es coneixen sobre ell són de finals del segle XIX quan s'intentava trobar una alternativa a la quinina. Aquesta era utilitzada com a antipirètica i antimalarial però els seus recursos eren escassos i per això es van desenvolupar dos nous fàrmacs: la acetanilida i la fenacetina. Ambdós compostos produïen una deformació en els glòbuls vermells que impedia el bon transport d'oxigen en el cos, fet que contrastava amb la seva eficiència com a analgèsics i antipirètics que venia determinada per la ràpida absorció del seu principal metabòlit, el paracetamol; va ser sintetitzat per primera vegada als Estats Units l'any 1878 per Harmon Morse. En aquell moment no se li va donar la importància merescuda al descobriment fins que el premi Nobel Julius Axelrod, bioquímic estatunidenc, i Bernand Brodie el van introduir en el mercat farmacèutic del Regne Unit l'any 1956. Des de llavors, l'ús i la comercialització del paracetamol va passar a ser d'escala mundial i actualment és l'analgèsic més venut ja que no requereix prescripció mèdica.

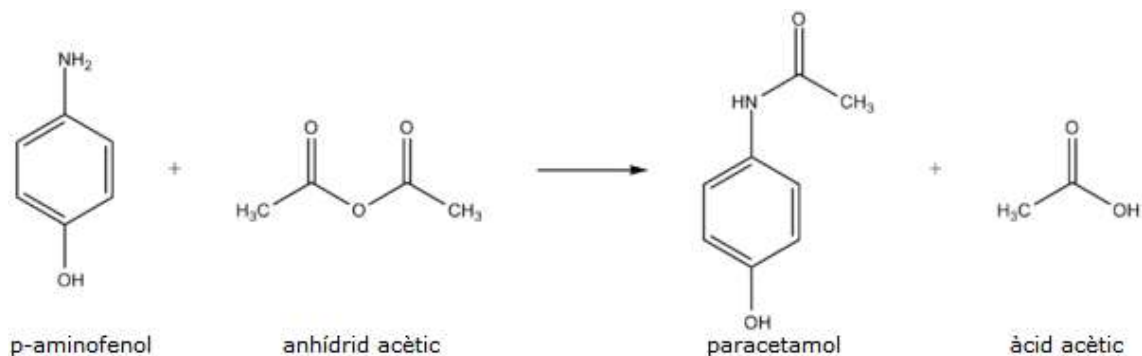
El seu nom, acetaminofèn, ve donat per la seva nomenclatura tradicional: N-acetil-para-aminofenol i para-acetil-aminofenol. Però segons la regulació de la norma IUPAC del 1993 el compost es el N-(4-hidroxifenil)etanamida.

Tal i com indica el seu nom, està format per un grup acetat, un grup amida i un fenol, disposats de la següent manera:



**Figura 1.** Fórmula del paracetamol.

La principal via de producció industrial del paracetamol és a partir del p-aminofenol, obtingut mitjançant la nitració i la posterior reducció del fenol. [Marín Loaiza, J.C et al., 2011]. Un cop aconseguit el reactiu se'l fa reaccionar amb anhidrid acètic i com a resultat de l'acetilació s'obté paracetamol i àcid acètic, ja que l'àtom de nitrogen del grup amina és més nucleòfil que l'oxigen de l'hidroxil.



**Figura 2.** Síntesis del paracetamol a partir de p-aminofenol.

#### 1.4.1. Mecanisme d'acció

El paracetamol, com a analgèsic que és, té la capacitat de reduir el dolor i la febre però no de disminuir la inflamació, ja que no té capacitat antiinflamatòria. Aquest fet i que no provoca irritacions en la mucosa gàstrica de l'estomac són les dues principals característiques que el diferencien de la seva gran competidora: l'actelcisteïna.

Durant anys s'havia pensat que ambdós fàrmacs compartien mecanisme d'acció inhibint la síntesi de les prostaglandines i més concretament dels enzims de les ciclooxigenases del sistema nerviós, però després de nombrosos estudis s'ha vaticinat que actuen sobre diferents enzims. Mentre el paracetamol actua sobre el COX-3 (augmentant el llindar del dolor) l'aspirina ho fa sobre el COX-1 i COX-2. Aquest mecanisme provoca, com a efecte secundari o per una ingestió massa elevada, alteracions hepatòxiques en el fetge i en els ronyons.

Les investigacions en aquest àmbit segueixen desenvolupant-se avui en dia per aclarir exactament com es du a terme aquesta activitat i aportar-ne una visió més concreta.

#### *1.4.2. Propietats fisico-químiques*

Les seves principals propietats fisicoquímiques es recullen en la taula mostrada a continuació, juntament amb els codis amb el que el regulen les diferents institucions:

**Taula 1.** *Propietats del paracetamol.*

<b>CAS<sup>1</sup></b>	103-90-2
<b>RTECS<sup>2</sup></b>	AE4200000
<b>EINECS/CE<sup>3</sup></b>	203-157-5
<b>Substància:</b>	Acetaminofèn p-Acetilaminofenol
<b>Fórmula molecular</b>	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>
<b>Densitat</b>	650kg/m <sup>3</sup>
<b>Pes molecular</b>	151.17 g/mol
<b>Solubilitat en aigua a 20°C</b>	14g/l
<b>Punt ebullició</b>	> 500°C
<b>Punt fusió</b>	169°C – 171°C
<b>Estat físic</b>	Pols finament cristal·litzada
<b>Color</b>	Blanc
<b>Conservació</b>	En lloc fresc i tancat hermèticament.
<b>Informació toxicològica</b>	
Es pot absorbir per ingestió. Davant d'una exposició prolongada o repetida o per ingestió d'altres dosis, pot provocar alteracions al fetge i	

<sup>1</sup> Chemical American Society

<sup>2</sup> Registry of Toxic Effects of Chemical Substances

<sup>3</sup> Inventario Europeo de Sustancias Químicas Existentes

als ronyons, donant lloc a una alteració hepàtica o renal. Els efectes poden aparèixer de forma no immediata.

**Risc d'inhalació:** Tot i que a 20°C la seva evaporació és menyspreable, es pot arribar fàcilment a una concentració molesta de partícules en l'aire que provoca tos.

## 1.5. Processos d'oxidació avançada (AOP's)

Els processos d'oxidació avançada (Advanced Oxidation Processes) són mètodes molts utilitzats en els darrers anys en la depuració d'aigües residuals, de sòls, d'atmosfera interiors i exteriors, en la neteja de superfícies tèxtils contaminades amb matèria orgànica... Focalitzant dins el tractament d'aigües són classificats com a tractaments terciaris, ja que inicialment n'hi ha un de primari o fisicoquímic, seguit d'un secundari o biològic. Són adients per tractar volums inferiors a 50m<sup>3</sup> i carregues de contaminant relativament baixes. Es duen a terme en medi aquós i a pressió i temperatura ambient i la seva principal característica és que generen espècies radicalàries d'alt poder oxidant, com els radicals  $\cdot\text{OH}$  que tenen la capacitat de mineralitzar totalment el component orgànic present. Requereixen activadors (com ferro, font de radiació o altres) que iniciïn la reacció i reactius específics (com H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>...) que els comporta un cost extra en comparació amb els tractaments biològics. Però tot i això gaudeixen d'una ampla llista d'avantatges:

- Acostumen a assolir una mineralització completa.
- Són útils per a compostos orgànics de diverses naturaleses.
- Consumeixen menys energia que altres mètodes, com la incineració.
- Descomponen els reactius emprats com a oxidants en productes innocus.
- No utilitzen dissolvent orgànics o substàncies auxiliars, al fer-ho en dissolució aquosa.
- Utilitzen matèries primeres renovables, com l'oxigen.
- Permeten transformar contaminants refractaris en productes tractables per mètodes més econòmics.



Alguns d'aquests avantatges fan que s'anomeni als processos d'oxidació avançada com a processos verds, com a conseqüència del seu baix impacte ambiental [Muñoz, 2006].

Se'ls classifica en dos grans grups diferenciats per l'ús de radiació, i alguns dels més utilitzats són els descrits a la taula 2:

**Taula 2.** *Principals processos d'oxidació avançada.*

<b>NO FOTOQUÍMICS</b>	<b>FOTOQUÍMICS</b>
Ozonització: <ul style="list-style-type: none"><li>- <math>O_3/\cdot OH</math> (Medi alcalí)</li><li>- <math>O_3/H_2O_2</math></li><li>- Electrolítica</li></ul>	Fotòlisis: <ul style="list-style-type: none"><li>- Ultraviolada de buit (VUV)</li><li>- <math>UV/H_2O_2</math></li><li>- <math>UV/O_3</math></li></ul>
Fenton: <ul style="list-style-type: none"><li>- <math>Fe^{2+}/H_2O_2</math></li></ul>	Foto-Fenton: <ul style="list-style-type: none"><li>- <math>Fe^{2+}/H_2O_2/UV</math></li></ul>
Oxidació en aire humit	Fotocatàlisis heterogènia

Per acabar, destacar que sovint és freqüent trobar processos que combinen diferents oxidacions avançades però en aquest projecte han estat objecte d'estudi únicament: Fenton i Foto-Fenton.

#### *1.5.1. Reacció Fenton*

Les reaccions Fenton deuen el nom al britànic H. J. H. Fenton que l'any 1894 va descobrir que les sals de ferro milloraven la capacitat oxidant del  $H_2O_2$ . Existeixen tres tipus de reaccions Fenton:

- Fenton ( $Fe^{2+}/H_2O_2$ ): el Ferro es troba en l'estat d'oxidació II i no utilitza radiació.
- Fenton-like ( $Fe^{3+}/H_2O_2$ ): el reactiu és ferro en estat III.
- Foto-Fenton ( $Fe^{2+}/H_2O_2/UV$ ): és una reacció fenton però amb radiació ultraviolada.

Totes aquestes reaccions produeixen radicals hidroxils HO·, que en medi aquós i ph àcid (perquè no precipiti el peròxid), degraden la matèria orgànica seguint un dels tres mètodes següents [Prousek, 1995]:

- Per abstracció d'hidrogen en alcans:



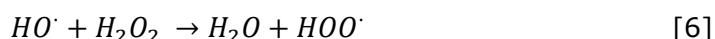
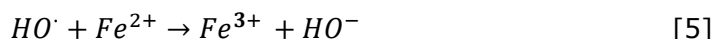
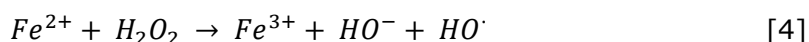
- Per transferència d'electrons:



- Per addició electrofílica a un doble enllaç:



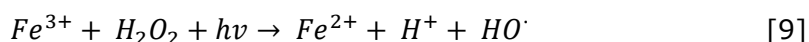
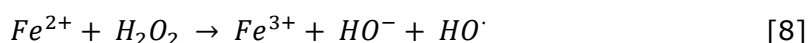
Les reaccions que es duen a terme en el procés Fenton, segons el mecanisme de Haber-Weiss, són les següents:



Si en la reacció principal hi ha un excés de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> o de Fe<sup>2+</sup> això provoca l'aparició de més radicals HOO·, que tal també descomponen la matèria orgànica però són molt menys reactius que els HO·.

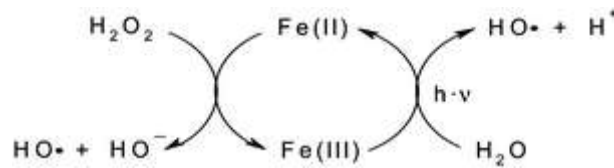
### 1.5.2. Reacció Foto-Fenton

La reacció foto-fenton és deguda a la combinació de radiació ultraviolada/visible amb els reactius Fenton. La velocitat de degradació dels contaminants s'accelera al augmentar la producció de grups HO·, amb la fotòlisis dels compostos complexes de Fe<sup>3+</sup> regenerats a la seva forma reduïda. En aquest cas, les reaccions involucrades són:



El cicle catalític que segueix la reacció foto-fenton s'inicia amb el canvi d'estat de ferrós a fèrric del reactiu Fenton amb el peròxid d'hidrogen generant radicals HO·, molt reactius i necessaris per la descomposició de la

matèria orgànica. A continuació, es produeix la fotoreducció gràcies a la radiació generant de nou més radicals.



**Figura 3.** *Cicle catalític de la reacció Foto-Fenton.*

Cal destacar també, les reaccions de descomposició del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>:



La que genera més radicals és la primera (10) tot i que, en menor mesura, una part del peròxid d'hidrogen es descompon seguint la segona reacció (11) i produint radicals HOO•, reaccionant més lentament.

Quan s'utilitza radiació compresa entre 290 i 570 nm és quan s'obté una major eficiència del procés, fet que indica que la radiació solar és adient per aquests mètode ja que fa disminuir considerablement el cost del tractament.

## 1.6. ESTAT DE L'ART

El recent augment de la concentració de paracetamol en les aigües residuals és degut a un creixement exponencial d'aquest en els darrers anys. Actualment, les concentracions més significatives que s'han observat han estat de menor a major grau: en efluent europeus 6mg/L, en aigües naturals dels Estats Units 10mg/L mentre que al riu Tyne al Regne Unit es va arribar als 65mg/, segons un estudi realitzat l'any 2008. (Yang, 2008)

Després de veure aquestes dades, és normal que siguin molts els projectes duts a terme per buscar un mètode que degradi aquest contaminant i purificar l'aigua. Han estat moltes les investigacions utilitzant processos d'oxidació avançada. Andreozzi(Andreozzi et al. 2003) va estudiar l'oxidació

del paracetamol per ozonització i la fotòlisi-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> i va demostrar que és capaç d'eliminar completament el substrat amb graus de mineralització de fins a 30% i 40% respectivament. A més a més va identificar els productes intermedis i va poder fer un model de la constant cinètica d'atac de l'ozó al substrat, en el interval de pH 2.0-5.5. Moctezuma va realitzar un experiment semblant però amb el mètode TiO<sub>2</sub>/UV (Moctezuma, et al. 2012) estudiant també els seus intermedis i obtenint bons resultats, mentre que Cabrera (Cabrera, et al. 20014) va realitzar un projecte amb l'objecte d'estudi semblant a aquest, la reacció foto-Fenton.



# **CAPÍTOL 2: MÈTODES ANALÍTICS**

Per poder fer un seguiment acurat de la reacció a estudiar s'utilitzen diferents mètodes analítics que ens determinen les variables d'estudi. A continuació, s'explica el fonament en el que es basa cadascun, el material necessari per dur-lo a terme i un esquema del sistema intern de la maquinària utilitzada, si s'escau.

Els quatre mètodes a explicar són:

1. Determinació del TOC
2. Determinació de  $H_2O_2$
3. Variables Online
  - a. pH
  - b. Potencial redox
  - c. Conductivitat
  - d. Oxigen dissolt

## 2.1. Determinació de TOC

La determinació del TOC indica la quantitat de carboni orgànic que conté la mostra, independentment de l'estat d'oxidació en que es trobi la matèria orgànica. Mitjançant un analitzador de Carboni Total Orgànic de la marca Shimadzu i model CVSH/CSN es pot mesurar el Carboni Total (TC), el Carboni Inorgànic (IC), el Carboni Orgànic Total (TOC) i el Carboni Orgànic No Purgable (NPOC).

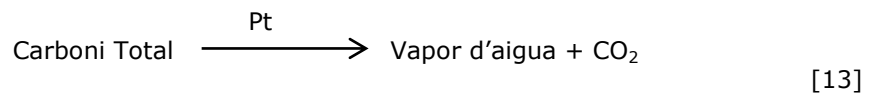


**Figura 4.** Analitzador TOC. Marca Shimadzu, Model TOC-VCSN. [SHIMADZU]

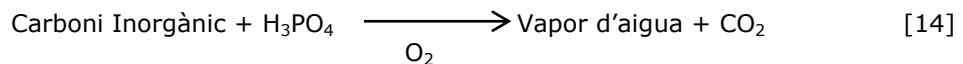
En aquest cas, només es determina el TC i IC i per diferència dels dos valors s'obté el TOC:

$$\text{TOC [ppm]} = \text{TC} - \text{IC} \quad [12]$$

Un tub amb aire comprimit succiona la mostra i l'oxida tot el component orgànic d'aquesta per combustió catalítica en un forn a 680°C amb platí. El producte que s'obté es refreda i es fa passar per un deshumidificador que evapora el vapor d'aigua produït, restant-ne només CO<sub>2</sub> que es transporta a través d'una corrent d'aire fins un detector d'infrarojos no dispersiu (NDIR) on i s'analitza. Aquest valor és el TC:



Un cop conegut el valor del carboni total, inorgànic i orgànic, es procedeix a determinar el IC. A temperatura ambient, es ruixa la mostra inicial amb àcid fosfòric per reduir-ne el ph per sota de 3 i obtenir diòxid de carboni, compost per carbonats i bicarbonats. Seguint el mateix mètode que la determinació del carboni total, aquest es volatilitza per bombolleig i s'arrossega per aire fins al detector NDIR.



La mesura TOC, com s'ha dit anteriorment, es calcula restant els dos valors acabats de calcular. El diagrama de flux del procés descrit es representa segons la següent imatge:



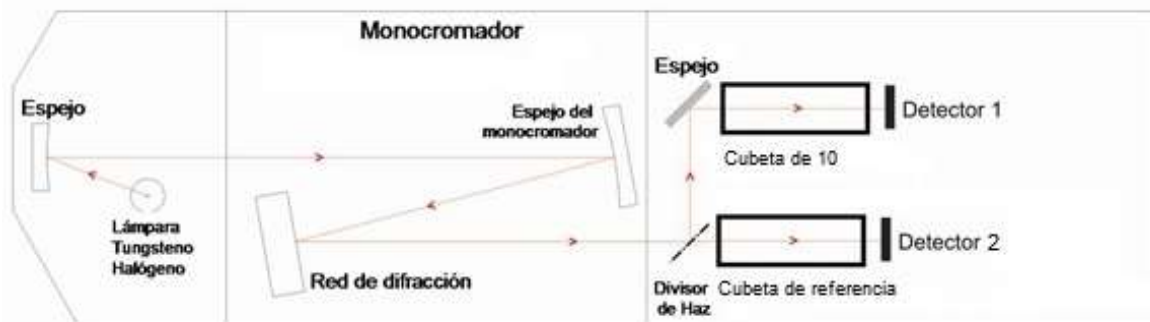
## 2.2. Determinació de $\text{H}_2\text{O}_2$ per espectrofotometria.

Per determinar la concentració de peròxid d'hidrogen al llarg de la reacció s'utilitza l'espectrofotòmetre Lambda 2 UV/VIS de Perkin Elmer, basat en el fonament acabat d'explicar.



**Figura 6.** Espectrofotòmetre Lambda 2 UV/VIS. [Perkin Elmer]

El sistema intern de l'espectrofotòmetre està format per una font de radiació, un selector d'ones o monocromador, un compartiment per col·locar la cubeta i un detector. La llum emesa per la font es redirecciona gràcies a un mirall de condensació a través de la reixeta d'entrada al monocromador. La xarxa de difracció dispersa l'energia en rajos monocromàtics a través de la reixeta de sortida i el filtra fins al mirall toroïdal. Aquest el reflexa i el divideix en el feix de mostra i el de referència que travessen les seves corresponents lents condensadores fins arribar als detectors de fotodis de silici que converteixen la senyal lluminosa en electrònica. Aquest funcionament es basa en la llei Bourguier, Lambert i Beer, els qual van establir la relació entre la variació de la intensitat de llum transmesa i la concentració.



**Figura 7.** Sistema òptic de l'espectrofotòmetre.<sup>4</sup>

<sup>4</sup> Diagrama òptic d'un espectrofotòmetres de la marca Femto: [www.femto.com.br](http://www.femto.com.br)

Depenent del rang de llum amb el que es treballi cal canviar el material de la cubeta, en aquest cas per determinar el  $H_2O_2$  es treballa amb una longitud d'ona de 450 nm i s'utilitzen dues cubetes de plàstic.

## **Recta de calibratge del peròxid d'hidrogen**

### 1. Preparació dels reactius

#### a) Dissolució $H_2SO_4$ [9M]

Per preparar 100 ml d'aquesta dissolució, s'han de calcular els ml de  $H_2SO_4$  que s'han d'afegir en funció de la seva puresa. Exemple de càlcul per preparar 100mL de dissolució partint d'un reactiu pur al 96% i una densitat de  $1,84 \text{ g} \cdot \text{ml}^{-1}$ :

$$100 \text{ ml} \times \frac{9 \text{ moles}}{1000 \text{ ml}} \times \frac{98,08 \text{ g}_{\text{puro}}}{1 \text{ mol}} \times \frac{100 \text{ g}_{\text{reactivo}}}{96 \text{ g}_{\text{puro}}} \times \frac{\text{ml}}{1,84 \text{ g}} = 49,97 \text{ ml}$$

### Instruccions

- En un vas de precipitats posar uns 20 ml d'aigua desionitzada.
- A continuació afegir lentament el volum calculat del reactiu sulfúric concentrat.
- Quan s'hagi refredat enrasar amb aigua en un matràs aforat del volum corresponent.

#### b) Dissolució $H_2SO_4$ [0,58M] i de Vanadat Amònic [0,062 M].

Càlculs:

$$\frac{0,062 \text{ moles}}{1 \text{ L}} \times \frac{116,98 \text{ g}_{\text{puro}}}{1 \text{ mol}} \times \frac{100 \text{ g}_{\text{reactivo}}}{98,5 \text{ g}_{\text{puro}}} = 7,3632 \text{ g } NH_4VO_3$$

$$\frac{0,58 \text{ moles}}{1 \text{ L}} \times \frac{98,08 \text{ g}_{\text{puro}}}{1 \text{ mol}} \times \frac{100 \text{ g}_{\text{reactivo}}}{96 \text{ g}_{\text{puro}}} \times \frac{\text{ml}}{1,84 \text{ g}} = 32,20 \text{ ml } H_2SO_4$$

\*Com l'estequiometria de la reacció és 2 mols de  $H_2SO_4$  per 1 mol de  $NH_4VO_3$  s'ha d'afegir el doble de sulfúric: 64,40 ml.

### Instruccions

- Pesar los 7,3632gramos de vanadat amònic

- Afegir els 7,3632g de vanadat amònic sobre los 64,4mL d'àcid sulfúric 9M agitant contínuament amb un agitador magnètic per evitar que el sòlid s'enganxi en el fons i no es dissolgui en la seva totalitat
- Escalfar a 50 °C amb agitació fins la dissolució del vanadat amònic.
- Quan s'hagi refredat enrasar amb aigua en un matràs aforat de 1L.

## 2. Preparació de les dissolucions patrons per la recta de calibratge

S'anomena:

X→ Dissolució  $\text{H}_2\text{SO}_4$  [0,58M] i Vanadat Amònic [0,062M] prèviament preparada

A→ 0,909ml de  $\text{H}_2\text{O}_2$  (33% p/v) enrasat amb aigua a 100ml

### a) Preparació

Per preparar els patrons es segueix la següent taula:

**Taula 3.** *Quantitats per preparar els patrons.*

Patró	ml X	ml A	ppm $\text{H}_2\text{O}_2$
Blanc	10	0	0
1	10	1	30
2	10	2	60
3	10	3	90
4	10	4	120
5	10	5	150

Tots els patrons s'enrasen amb aigua desionitzada fins a 100ml en un matràs aforat. A l'annex X es pot observar els resultats de la recta de calibratge.

## 2.3. Mesures online

Gràcies a la planta pilot es poden realitzar una sèrie de mesures online al llarg de tota la reacció. A diferència de les mesures descrites anteriorment, en les qual s'agafava una mostra per determinar-ne el TOC i la concentració de peròxid en uns instants determinats, aquestes són enregistrades pels sensors de la planta cada segon. Les variables que es poden registrar són: el pH, el potencial redox, la conductivitat, l'oxigen dissolt, el cabal, el de recirculació, la temperatura del dipòsit, la temperatura del reactor i la intensitat de la llum del reactor.

Es para especial atenció en les quatre primeres ja que és interessant observar com varien al llarg del temps, ja que les altres es fixen a valor constant o no influeixen de manera significativa.

1. pH: el sensor utilitzat és un pH-metre amb una membrana de vidre que conté un elèctrode de plata en el seu interior submergit en una solució saturada de Ag/Cl. Quan el sensor s'introdueix en la mostra es produeix un intercanvi de  $H^+$  entre l'interior i l'exterior de la membrana que provoca una diferència de potencial respecte a l'elèctrode de referència.
2. Potencial redox: és una tècnica electroanalítica que mitjançant la mesura de la quantitat d'electrons respecte a un elèctrode de referència de valor constant i conegut, permet determinar la concentració d'una espècie electroactiva d'una dissolució. També permet conèixer si la reacció ve donava per una reducció, quan el valor del ORP és negatiu, o per una oxidació quan el valor és positiu.
3. Conductivitat: la conductivitat elèctrica és la capacitat que té un material per transmetre el corrent elèctric. En el cas de ser en medi líquid, està relacionada amb la concentració de sals en dissolució, ja que generen ions positius i negatius que transporten l'electricitat, i és proporcional al pH, degut a la presència de ions  $OH^-$ . Es mesura amb un conductímetre.

4. Oxigen dissolt: es determina amb un sensor per mesura directa. Determina la concentració d'oxigen dissolt en aigua. Aquesta variable s'utilitza com a indicador de la contaminació d'aigües, es considera que quan la concentració és inferior al 30% és perjudicial per la supervivència d'éssers vius, mentre que quan és molt elevada ho és pels éssers anaeròbics al haver-hi contaminació per matèria orgànica. L'oxigen dissolt varia inversament proporcional a la temperatura, ja que les aigües fredes poden contenir més quantitat d'oxigen que les calentes.



# **CAPÍTOL 3: MÈTODE EXPERIMENTAL**



En aquest capítol es detallen les condicions de treball amb les que s'han realitzat els diferents experiments. A més, inclou un esquema experimental detallat de la planta pilot utilitzada i la metodologia que s'ha seguit, pas a pas. Per concloure, cal tenir en compte la seguretat tant amb els productes químics com al laboratori i s'explica el marc teòric pel qual s'han elegit les condicions de treball.

### 3.1. Condicions de treball

La planta pilot on es realitzen els experiments permet treballar amb diferents condicions de treball, ja que conté un dipòsit de màxim 15L d'aigua, se li poden afegir diferents reactius, se'n pot variar la radiació, es pot estudiar tant les reaccions Fenton, Foto-Fenton o Fenton-like, es pot dosificar en el temps l'addició dels reactius... Totes aquestes variacions podrien ser objecte d'estudi però en aquest cas s'ha decidit fixar un conjunt de paràmetres, mostrats a continuació, i variar-ne únicament la concentració inicial de contaminant i reactius:

**Taula 4.** *Paràmetres escollits per la realització de l'estudi.*

Paràmetres	
pH = $2.7 \pm 0.3$	Cabal de recirculació = 12 L/min
Temperatura ambient (aprox. 25°C)	Cabal de línia = 1 L/min (Auto)
Temps = 2h	Làmpada
Volum total = 15 L	

En l'estudi dels blancs realitzat per comprovar l'efectivitat del procés foto-Fenton en comparació amb el Fenton, s'afegeix com a variable d'estudi la radiació.

**Taula 5.** Variables d'estudi en la reacció Fenton i Foto-Fenton.

Variables d'estudi
Concentració inicial del contaminant
Concentració inicial Ferro
Concentració inicial H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
Evolució del TOC en el temps
Evolució de la conc. de H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>

Per determinar l'evolució del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> al llarg de la reacció és necessari prendre mostres cada un cert interval de temps seguint el procediment descrit:

Presa de mostres:

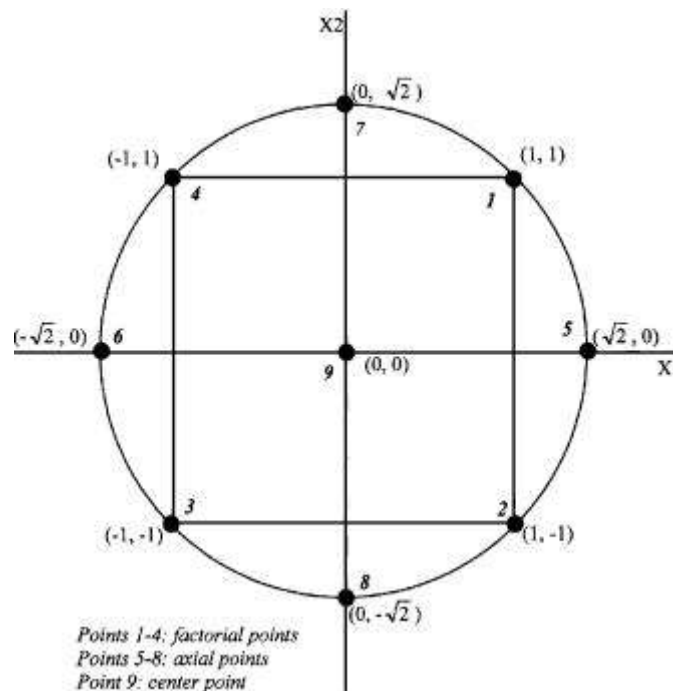
- Determinació del TOC: agafar i retolar els tubs d'assaig necessaris per les mostres a temps 0' abans d'afegir el Fe, 0' previ a l'addició de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 5', 10', 15', 30', 45', 60', 75', 90', 105' i 120'. Quan es recull la mostra, s'omple el tub fins quasi la seva totalitat i es deixa refredar en un recipient amb gel per aturar la reacció.
- Determinació del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: agafar i retolar els matrassos aforats de 10mL necessaris per les mostres recollides a temps 5', 10', 15', 20', 25', 30', 45', 60', 75', 90', 105' i 120'. Afegir 1,1mL de metavanadat amònic a cada matràs i omplir el que s'utilitza pel blanc amb aigua desionitzada fins enrasar. Tal i com s'explica al PNT de la determinació del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, afegir 5 mL de mostra a cada matràs amb una micropipeta d'1mL, en alguns casos s'afegeixen 2mL per no saturar el sistema ja que el metavanadat sempre s'ha de trobar en excés, i per acabar s'enrasen tots amb aigua destil·lada.

Les mostres agafades per determinar el TOC es mesuren amb l'analitzador de TOC i les del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> amb l'espectrofotòmetre i es guarden les dades obtingudes en una plantilla d'Excel, adjuntada en l'annex X. En aquest document cal indicar també les comprovacions prèvies per cada experiment, que s'expliquen en el pròxim subapartat.

El disseny experimental que es segueix al llarg del projecte:

- Inclou uns experiments blancs previs per comprovar que la mineralització ve donada per la reacció Foto-Fenton, es realitzen tots amb i sense radiació.
- Es verifica, en l'estudi preliminar, que calen els dos reactius per produir-se la degradació del paracetamol, per això es realitzen experiments sense Fe i altres sense  $H_2O_2$ .
- Es segueix un disseny en estrella  $2^2$ .

El disseny experimental del procés és en estrella  $2^2$  i es basa en el disseny de superfície de resposta, això vol dir que parteix d'un experiment central considerat el punt de referència (0,0) i a partir d'aquí modifica les variables: x, concentració de PCT, i y, concentració de  $H_2O_2$ . de manera que pot seguir



**Figura 8. Esquema disseny experimental en estrella.**<sup>5</sup>

Més endavant en els resultats experimentals s'estudia quin model segueix, ja que aquest pot ser lineal, quadràtic...

<sup>5</sup> Font: Engineering Statistics Handbook  
[www.itl.nist.gov/div898/handbook/pri/section3/pri3361.htm](http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pri/section3/pri3361.htm)

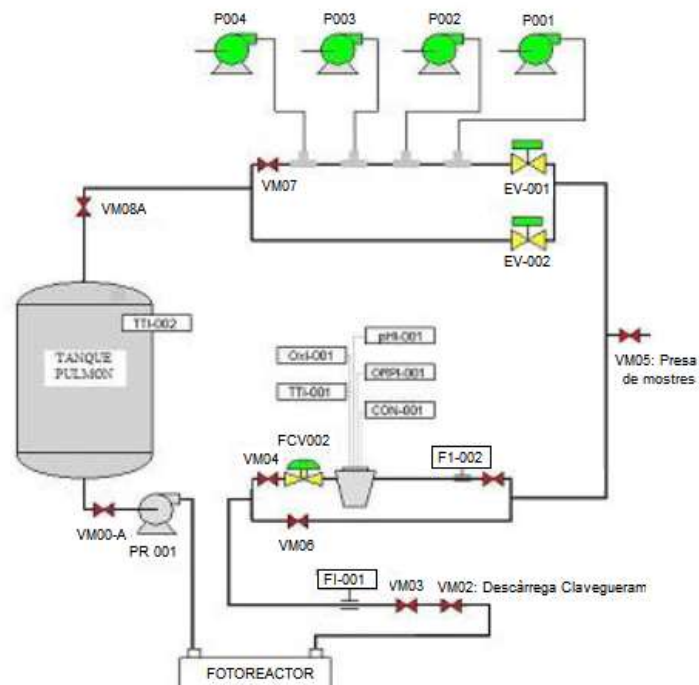
A continuació es detallen els experiments, tots han estat realitzats per duplicat, excepte l'experiment central PCT\_40\_10\_378\_ON que s'ha dut a terme per quadruplicat:

**Taula 6.** Disseny dels experiments realitzats en la planta pilot.

<b>BLANCS</b>				
Codi Experiment	PCT [ppm]	Fe [ppm]	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> [ppm]	Llum
PCT_40_0_0_ON	40	0	0	si
PCT_40_10_0_OFF	40	10	0	no
PCT_40_10_0_ON	40	10	0	si
PCT_40_0_378_OFF	40	0	378	no
PCT_40_0_378_ON	40	0	378	si
PCT_40_10_378_OFF	40	10	378	no
<b>VARIACIONS</b>				
PCT_20_10_189_ON	20	10	189	si
PCT_60_10_189_ON	60	10	189	si
PCT_20_10_567_ON	20	10	567	si
PCT_60_10_567_ON	60	10	567	si
PCT_40_10_378_ON	40	10	378	si
PCT_11.71_10_378_ON	11.716	10	378	si
PCT_68.28_10_378_ON	68.284	10	378	si
PCT_40_10_110.71_ON	40	10	110.713	si
PCT_40_10_645.29_ON	40	10	645.290	si

## 3.2. Esquema experimental

La planta pilot està formada per un conjunt d'elements entre els quals destaca el tanc principal de màxim 12 litres. Aquest va connectat a una bomba que en succona el seu contingut i determina el cabal de recirculació que surt després de passar per un fotoreactor. Aquest és redireccionat cap a un circuit que en aquest cas es deixa obert per retornar l'aigua al tanc principal en el que es fixa un cabal de línia a través del qual s'extreuen petites mostres per anar observant l'evolució de la reacció. En aquest punt es troba també un petit dipòsit amb quatre sensors que medeixen el pH, la conductivitat, el potencial redox i l'oxigen dissolt, mentre que també conté està dotada de quatre bombes peristàltiques que permeten la dossificació de diferents reactius. Tots aquests sensors estan connectats a software d'enregistrament de dades que permet controlar automàticament la planta mitjançant l'Scada Eurotherm. La pantalla principal del software mostra el circuit complet de la planta que permet determinar tots els elements descrits:



**Figura 9. Esquema de la planta pilot.**

La imatge real de la planta on es poden identificar les parts de l'esquema és troba a l'annex X, en el procediment normalitzat de treball amb la planta pilot.

### 3.3. Metodologia experimental

Procediment de treball per realitzar els experiments amb la planta pilot:

1. Verificar que el tanc i les connexions estan buides i sense residus d'assajos anteriors.
2. Verificar que la vàlvula 2 (drenatge) i la 5b (presa de mostra) estan tancades.
3. Verificar que les ampolles d'àcid i base disposen d'un volum suficient per variar el pH.
4. Retirar la solució tampó en la que es troben submergits els sensors i netejar-los amb aigua destil·lada. Tornar a col·locar la tapa de los sensors i guardar la solució tampó.
5. Verificar que els selectores FV002, P-REC, P-001, P-002, P-003 i P-004 del panell principal es troben en la posició "REMOT" (és a dir, controlats per l'SCADA. Obrir la clau de tensió vermella situada a la tapa exterior del quadre elèctric, il·luminant-se el LED blanc.
6. Encendre l'ordinador i inicialitzar l'SCADA (es troba a l'escriptori). Apareix "Initializing I/O..." i a continuació dos missatges en els que responem Si, Si. Si es queda penjat inicialitzant, tancar-lo amb Ctr+Alt+Supr i tornar a obrir-lo de nou.
7. Mentrestant, omplir tres matrassos de 5L cadascun amb aigua destil·lada i pesar la quantitat de paracetamol necessària (calculada segons l'Excel plantilla). Afegir-lo a un dels matrassos dissolent amb agitació magnètica.
8. Seleccionar mode manual, primera opció.
9. Seleccionar el muntatge a utilitzar (reactor principal + reactor tubular), tercera opció.
10. Obrir la vàlvula EV-001; es posarà en color verd.
11. Verificar que totes les bombes peristàltiques estan al 0.0%.
12. Programar el cabal de la línia de mostres FIC-002: Fixar-lo amb el set point a 1.0 (WSP) i seleccionar el mode automàtic.
13. Obrir la vàlvula motoritzada FCV-002 al 50%; es posarà en color verd/vermell.

14. Col·locar la bomba centrífuga OYPR-001 en "start"; es posarà en color verd.
15. Donar nom al arxiu d'adquisició de dades segons el codi del seu experiment i la data del dia corresponent en el botó "help.bmp" i clicar "enter" per tancar.
16. Carregar el tanc pulmó (reactor principal) amb la solució a degradar utilitzant l'embut.
17. Omplir aproximadament uns 6-7 litres si s'utilitza el reactor principal.
18. Obrir la caixa del PLC de la planta y accionar el variador de freqüència VF-1 amb el botó verd/vermell de sota a la dreta.
19. Posar el "demand" de l'SCADA de la bomba centrífuga OYPR-001 al percentatge desitjat para aconseguir el cabal establert. (Al 85% seran 12L/min) i acabar d'afegir el volum de mostra al reactor a través de l'embut.
20. Una vegada estabilitzat el flux, (comprovant la FI-002), col·locar en automàtic la vàlvula FCV-002. Si el flux no baixés, disminuir manualment el flux, primer al 30% i després al 50%, per exemple.
21. Deixar 15 minuts recirculant per homogeneïtzar i mentrestant:
  - a. Ajustar el pH amb les ampolles de solució àcida i bàsica i la micropipeta per fixar-lo a 2,7.
  - b. Pesar la quantitat de sulfat de ferro necessària, calculada segons l'Excel plantilla.
  - c. Preparar els matrassos de 10mL amb 1,1mL de metavanadat amònic.
  - d. Preparar els tubs d'assaig per la presa de mostres pel TOC.
  - e. Preparar un vas de precipitats gran amb gel.
22. Una vegada ajustat el pH, connectar a l'interruptor la làmpada del foto-reactor (triga uns 10 minuts en escalfar-se) i agafar la mostra inicial a temps 0min per mesurar el TOC inicial només amb paracetamol, obrint la clau 5b.
23. Afegir el sulfat de ferro al reactor principal través de l'embut de vidre.
24. Tancar el plàstic opac que envolta al reactor para protegir-se de la radiació.
25. Esperar 15 minuts més i obtenir una segona mostra de TOC.
26. Addicionar la dosis de peròxid d'hidrogen inicial a través del embut, netejant amb una mica d'aigua de la vàlvula 5b per afegir-lo tot.
27. Marcar aquest temps como a 0:
  - a. Iniciar el cronòmetre

b. Posar el botó de encendido/apagado en "iniciar tot".

28. Anar agafant les mostres als temps fixats i conservar-les en fred fins el moment de mesurar-les.

29. Una vegada finalitzat l'assaig a les dues hores, parar l'adquisició de dades amb el botó encendido/apagado a "finalitzar tot".

30. Apagar la llum.

31. Obrir la vàlvula 2 per buidar el tanc principal.

32. Tancar la vàlvula 2 abans que el tanc es buidi totalment per evitar que la bomba treballi sense fluid.

33. Reomplir de nou el tanc amb aigua de l'aixeta per netejar-lo, obrint la l'aixeta de darrera la planta i comprovar que el tub va directa al tanc principal.

34. Deixar recirculant aquesta aigua pel sistema durant 20min connectat a l'SCADA amb la bomba al 85%.

35. Col·locar la canonada a la mànega de la vàlvula 5b i obrir-la a mesura que s'omple el tanc amb aigua simultàniament: entrarà aigua neta i sortirà i la bruta.

36. Cerrar la vàlvula 5b y volver a llenar con agua limpia. Dejar recircular unos 5min más

37. Repetir els passos [35-38] tantes vegades como sigui necessari tant amb aigua de l'aixeta com amb destil·lada fins a la neteja completa del tanc, els conductes i el dipòsit dels sensors. Recordar que la exhaustivitat d'aquest procés vindrà determinada per la naturalesa de la mostra tractada.

38. Procedir de nou a buidar el sistema obrint la vàlvula 2.

39. Parar la bomba OYPR-001 al 0% i accedir al quadre elèctric per aturar el variador de freqüència, botó verd/vermell de sota de tot a la dreta.

40. Assegurar-se que els conductes de l'equip han quedat totalment buits.

41. Deixar obertes les vàlvules del sistema per facilitar el drenatge del líquid.

42. Reomplir el dipòsit dels elèctrodes amb la solució tampó de KCl 3M, prèviament retirada.

43. L'arxiu d'adquisició de dades queda guardat a C:\datos. Copiar-lo i guardar-lo en un pendrive.

44. Tancar l'SCADA a través del "administrador de tareas" (ctrl+alt+supr).

45. Desconnectar el sistema mitjançant la clau de tensió vermella situada a la tapa exterior del quadre elèctric; s'ha d'apagar el LED blanc.



### 3.4. Seguretat i medi ambient

Abans d'entrar al laboratori cal tenir en compte les següents prevencions i recomanacions a l'hora de treballar, així com a l'hora de manipular productes. En ambdós casos cal aplicar sempre el sentit comú, sent necessari tenir en compte llavors els següents punts:

#### Al laboratori:

- Està prohibit menjar, fumar i beure dins del recinte del laboratori.
- És obligatori l'ús de bata, ulleres, guants de làtex, portar el cabell recollit i sabates tancades.
- És important saber on estan situats els extintors, dutxes, renta ulls i sortides d'emergència.
- Cal ser ordenat i tenir el lloc de treball net, per tal de reduir riscos de vessament i trencament de material de laboratori.
- Seguretat en la manipulació de productes químics
- Abans d'emprar un producte químic s'ha de llegir l'etiqueta i tenir present les fitxes de seguretat (Veure Annex: Fitxes de seguretat).
- Els productes que desprenguin vapors tòxics o inflamables s'han de manipular dins la vitrina fent ús de l'extractor de gasos i evitar al màxim l'exposició dels reactius a flames, espurnes i a temperatures molt elevades.
- Els residus s'han d'emmagatzemar en recipients especials. No s'ha de retornar mai cap reactiu a l'envàs original.

#### Medi ambient i sostenibilitat:

- S'ha de tenir en compte la informació de les fitxes de seguretat (Annex: Fitxes de seguretat).
- No es pot llençar cap producte químic per la pica.
- Cada residu es llença en el recipient adequat facilitant el reciclatge.
- Els reactius sobrants es dipositen en els bidons habilitats per cada tipus de reactius, per tal de que després puguin ser tractats.
- Les pipetes pasteur de plàstic han estat reemplaçades per pipetes de vidre, ja que son reutilitzables.

- S'han preparat grans volums de reactius per minimitzar les aigües de rentat.

Precaucions en la manipulació de làmpades:

- Les radiacions òptiques de les làmpades presenten un risc potencial per els ulls i la pell. És per aquest motiu, que és molt important protegir-los davant dels efectes nocius de les radiacions.
- Portar ulleres de protecció amb filtres adequades per protegir els ulls de las radiacions, sobretot en l'ús de làmpades làser o ultraviolades. Els possibles efectes per la vista son conjuntivitis e inflamació de la còrnia, que solen ser reversibles. Pero una inadequada exposició pot provocar cataractes.
- Cobrir el cos amb la bata i pantalons llargs, per evitar cremades en la pell.
- Les radiacions per sota dels 400 nm provoquen l'aparició de eritemes de varietat variable des de simples irradiacions fins a cremades profundes.
- Tambe són comunes les reaccions foto-al·lèrgiques en persones que prenen medicacions fotosensibles o persones amb certes malalties a la pell. Les longituds d'ona entre 280 i 300 nm són més perilloses per la pell i provoquen un elevat risc cancerigen. Per tant, és necessari extremar les precaucions i minimitzar-ne les exposicions.
- Per la manipulació i posicionament de les làmpades sempre seguir les instruccions d'ús del fabricant.
- Com estan connectades a la xarxa elèctrica i es troba col·locada dintre del reactor que conte aigua, cal extremar les precaucions per evitar riscos innecessaris.

Etiquetatge de residus químics:

Les etiquetes d'identificació dels residus químics generats a la UPC reuneixen els requisits establerts per la legislació de residus a nivell d'etiquetatge de producte i a nivell de transport de mercaderies perilloses per carretera. La informació que han de portar les etiquetes ha de ser la suficient i necessària per a informar del risc associat al mateix, tant al productor i al transportista com al gestor final del mateix. Les etiquetes han

estat personalitzades per a la UPC, que compta amb un model d'etiqueta genèrica per a cada grup de residus, que inclou els pictogrames i les frases de risc i seguretat associades.

### 3.5. Marc legal

Les condicions de treball escollides en el punt 3.1 tenen en consideració les ordenances europees, estatals i municipals sobre l'abocament d'aigües residuals. No tots els decrets sobre abocaments són igual de permissius però cal adequar-se a la normativa vigent segons la localització de l'activitat que provoca l'abocament i no sobrepassar els llindars establerts.

Com l'activitat del laboratori es troba dins l'Àrea Metropolitana de Barcelona s'ha decidit seguir el Butlletí Oficial de la província de Barcelona, del 9 de Febrer del 2015, basat en el Decret 130/2003, del 13 de Maig en el qual s'aprova el Reglament dels serveis públics de sanejament i que a la vegada ve precedit per la Directiva 2000/60/CE del Parlament Europeu i del Consell, de 23 d'octubre de 2000, per la que s'estableix un marc comunitari d'actuació en l'àmbit de la política d'aigües.

En tots ells s'hi especifica clarament que la concentració màxima de  $\text{Fe}^{2+}$  que està permès abocar és de 10mg/l, concentració a la que es treballa en tots els experiments.

En quant a la concentració de peròxid d'hidrogen cal destacar que és considerada una substància prohibida pel fet que els peròxids són corrosius. Per aquest motiu és important que la concentració final de  $\text{H}_2\text{O}_2$  sigui molt baixa, havent reaccionat en la seva totalitat. Això es podrà observar en les gràfiques de  $\text{H}_2\text{O}_2$  de cada experiment, en el següent capítol del projecte.

És molt important no sobrepassar els límits que estableixen aquestes directrius, ja que existeixen sancions en funció del límit sobrepassat i del cost extra d'eliminació que això comportarà a l'EDAR. A més aquestes sancions contempnen el tipus de residus abocat, havent-hi diferents graus de perillositat per cada un d'ells i segons el volum abocat es poden obtenir reduccions de les penes.

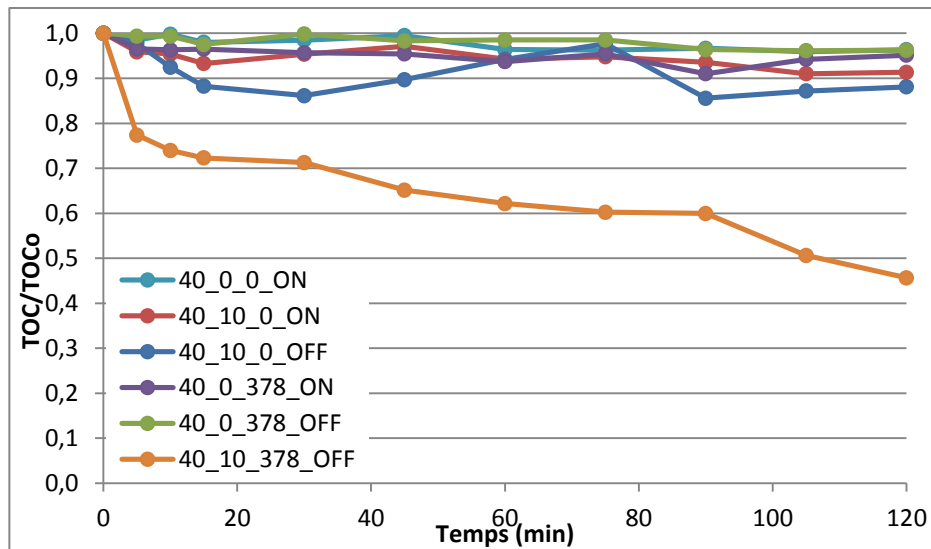
# **CAPÍTOL 4: RESULTATS EXPERIMENTALS**

En aquest capítol es mostren els resultats experimentals i se'n fa una discussió. Primerament, es tracten les dades dels experiments preliminars per verificar la dependència de la reacció foto-Fenton amb la concentració del reactiu fèrric, la del peròxid d'hidrogen i la radiació; i s'estudia també la diferències entre el procés Fenton i Foto-Fenton. A continuació, s'analitza un experiment central i les seves variacions modificant la quantitat de contaminant i la del peròxid, per poder determinar un estudi de ratis. Per últim, es mostren les dades enregistrades per la planta pilot sobre les variables online.

Cal destacar que en aquest apartat no es presenten totes les dades experimentals, aquestes han estat tractades prèviament per descartar els valors discrepants. En l'annex X es presenten la mitjana de les dades dels experiments ja que han estat duts a terme per duplicat i s'adjunten les gràfiques amb les corresponents desviacions estàndards de cadascun.

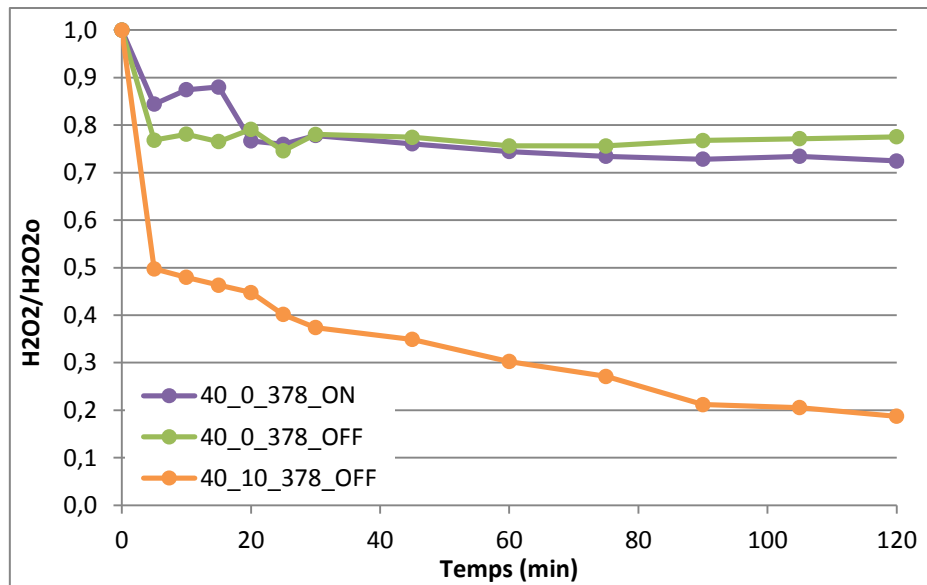
## 4.1. Experiments preliminars

Els sis experiments preliminars que s'han realitzat són tots amb una concentració de 40 ppm de paracetamol, i el que es fa és afegir una concentració nul·la de Ferro i/o de peròxid, per comprovar que totes dues variables són imprescindibles per la degradació. Com es pot observar a la figura següent, es representa la relació entre el TOC d'un instant concret respecte al TOC inicial de l'experiment. Aquesta relació permet observar el grau de degradació del component orgànic total.



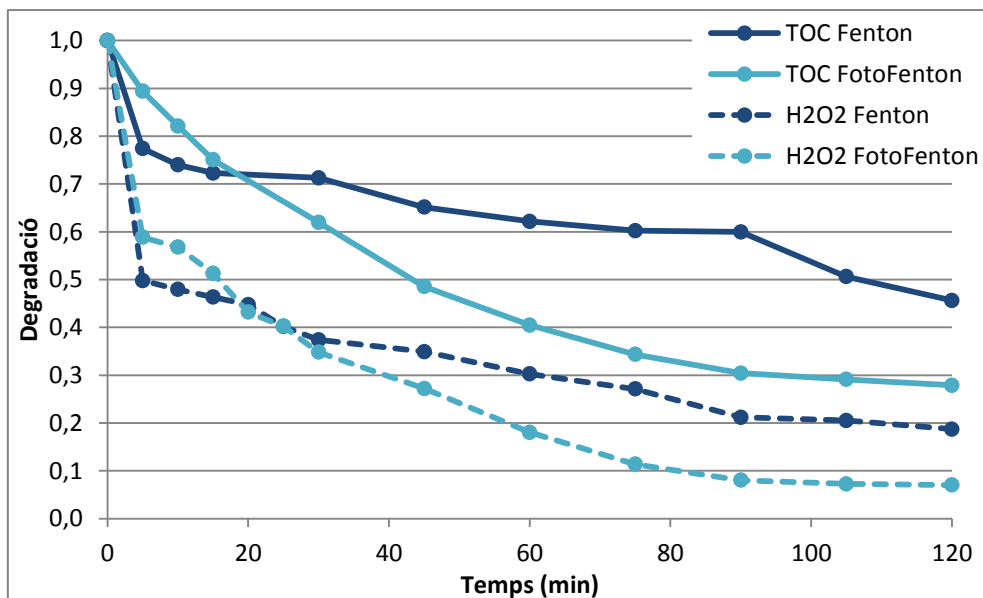
**Figura 10.** Resultats TOC/TOC<sub>0</sub> dels experiments preliminars.

Segons la imatge anterior i tal com s'esperava demostrar, quan només hi ha paracetamol dissolt en aigua, únicament amb radiació ultraviolada no es produeix degradació alguna, ja que es requereix una intensitat de llum menor a 190nm per obtenir resultats. [Domènech, et al.]. Tanmateix ocorre quan només hi ha paracetamol i Ferro o paracetamol i peròxid tant aplicant radiació com sense. Però al combinar el contaminant amb una concentració de 10ppm de Ferro i 378ppm de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> i sense presència de llum ultraviolada sí que es produeix una degradació de la matèria orgànica: a les dues hores d'experiment n'hi ha present un 55% menys aproximadament. Aquesta reacció és l'anomenada Fenton, i tal i com es mostra a continuació el H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> es consumeix en gran part per reaccionar amb el paracetamol, mentre que en els altres dos assajos amb peròxid al no haver-hi presència de ferro no s'observa el mateix comportament, tot i que en ambdós s'observa una petita degradació del peròxid que acaba essent la mateixa tant amb llum com sense, vora el 25%-30%. Cal dir, que la degradació màxima del peròxid es dona amb llums d'intensitat ultraviolada de 220 nm, tot i que es solen utilitzar llums de 254 nm. Amb presència de ferro es poden utilitzar llums de major intensitat.



**Figura 11.** Degradació del  $H_2O_2$  en els experiments preliminars.

A continuació es fa la comparació entre la reacció Fenton duta a terme com a experiment preliminar i la Fenton-Fenton, experiment central en el que es basa el disseny en estrella  $2^2$  i a partir del qual es realitzen les diferents variacions mostrades en el següent subapartat. En la gràfica es pot observar tant la variació del TOC com la del  $H_2O_2$ , representades en una sola imatge per poder apreciar-ne les variacions més clarament.



**Figura 12.** Comparació de l'evolució del TOC i del  $H_2O_2$  en els experiments Fenton i Foto-Fenton.

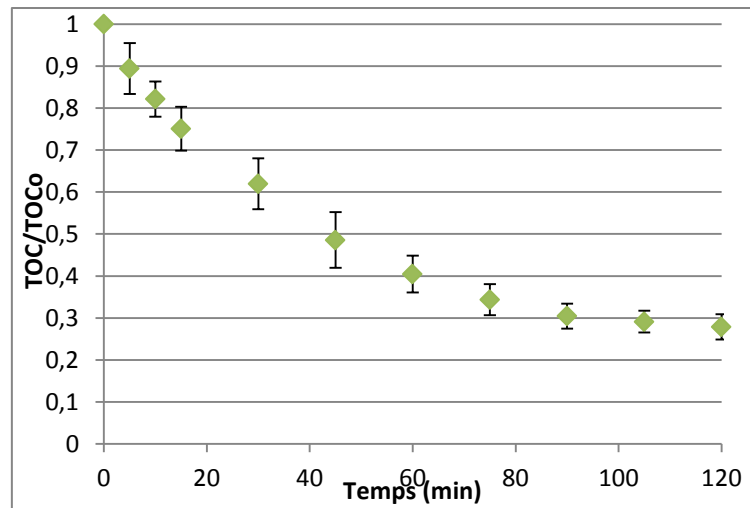
Tal i com es preveia, en la reacció Fenton provoca una degradació molt menor tant del TOC com del Peròxid. El seu rendiment per a la descomposició de la matèria orgànica és del 55% mentre que el del rendiment ho és del 72% i per conseqüència, les diferències també són significatives en el consum del  $H_2O_2$ , ja que pel Fenton es consumeix un 80% i en el Foto-Fenton més d'un 90%. En quant a la velocitat de la reacció del TOC, en el Foto-Fenton és més constant i sembla ser que segueix la mateixa tendència al llarg de tot l'experiment mentre que el Fenton en els primers 5' presenta un descens ràpid i a partir de llavors ja ho fa més linealment. Amb aquests previs es corrobora l'eficiència dels processos d'oxidació Fenton i Foto-Fenton per la degradació del paracetamol.

## 4.2. Variacions

L'estudi de la degradació del paracetamol està constituït per un experiment central dut a terme per quadruplicat i un seguit de variacions respecte aquest, concretament de la concentració del peròxid d'hidrogen i del contaminant, ja que la radiació serà present en tots els casos i la concentració de ferro es mantindrà constant a 10ppm.

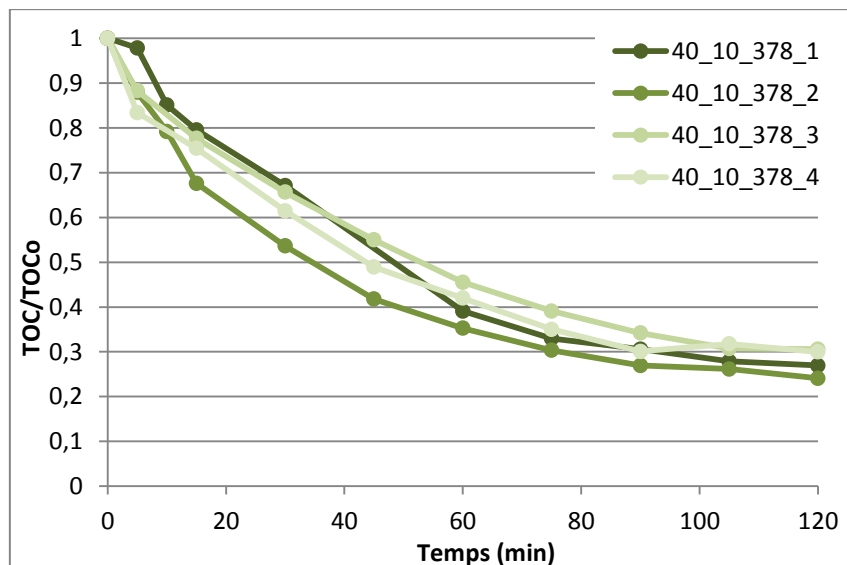
Primerament, es mostren els resultats dels quatre centrals i una gràfica amb la mitja i les variacions que presenten en funció de la seva desviació estàndard. Aquest procediment ha estat realitzat en tots els experiments en que s'ha fet repetició i a l'annex s'adjunten les gràfiques corresponents. En aquest apartat només es mostren com a exemple les gràfiques del procediment amb l'experiment central.





**Figura 13.** Representació de les desviacions estàndards dels centrals.

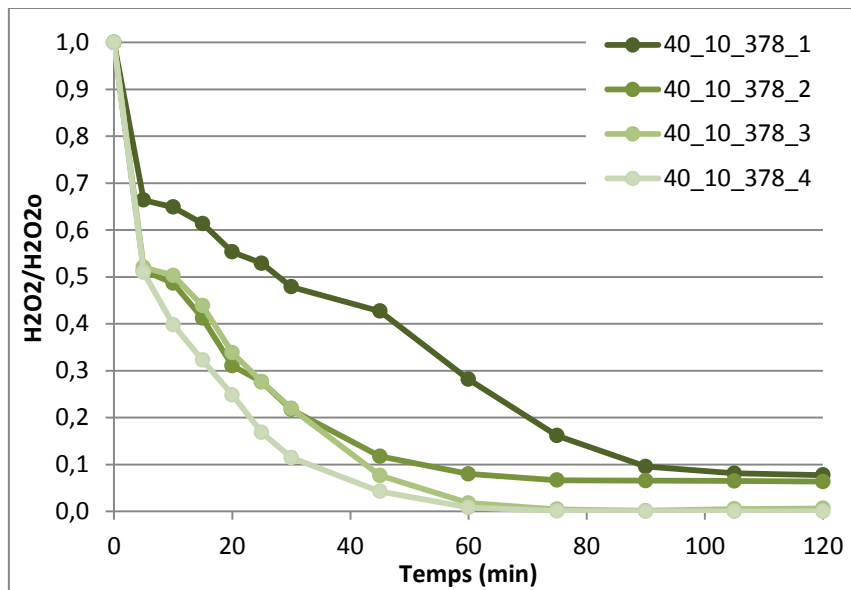
S'observa que les discrepàncies en els valors de temps menor són molt més elevades que a finals de l'experiment, ja que la reacció es para i la degradació acaba estabilitzant-se, fet que ha de donar un valor semblant en totes les variacions.



**Figura 14.** Variació del TOC/TOCo dels experiments centrals.

L'anàlisi de la variació del TOC és el que s'ha determinat anteriorment en la comparació Fenton/Foto-Fenton. L'experiment central és el format per 40ppm de PCT, 10ppm de Ferro i 378ppm de  $H_2O_2$  amb llum. Com s'ha comentat la degradació final de la matèria orgànica és del 72%, essent

aquesta la mitja dels quatre experiments. Mentre que la degradació final del peròxid d'hidrogen és de 93%, essent la mitja:

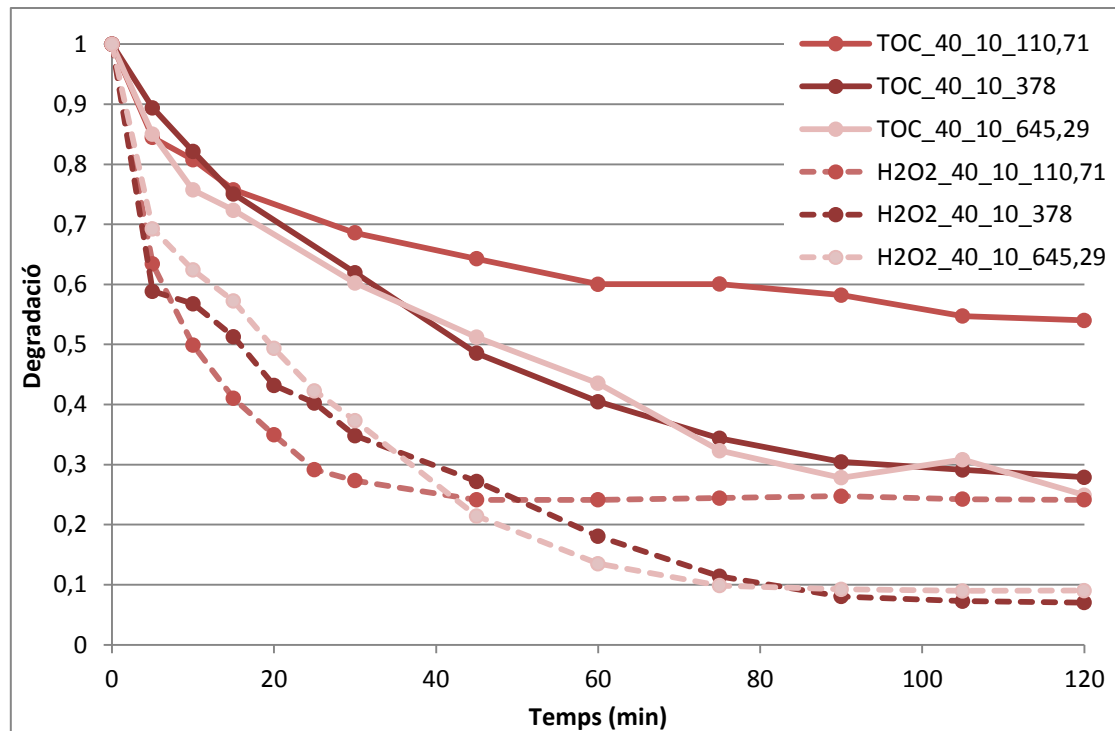


**Figura 15.** Variació del  $H_2O_2/H_2O_{2o}$  dels experiments centrals.

Seguidament es descriuen les variacions desenvolupades a partir de l'experiment central:

#### *4.2.1. Paracetamol constant a 40ppm*

Es realitzen tres experiments a diferents concentracions de  $H_2O_2$ : 378ppm, 110,71 ppm i 645,29 ppm.



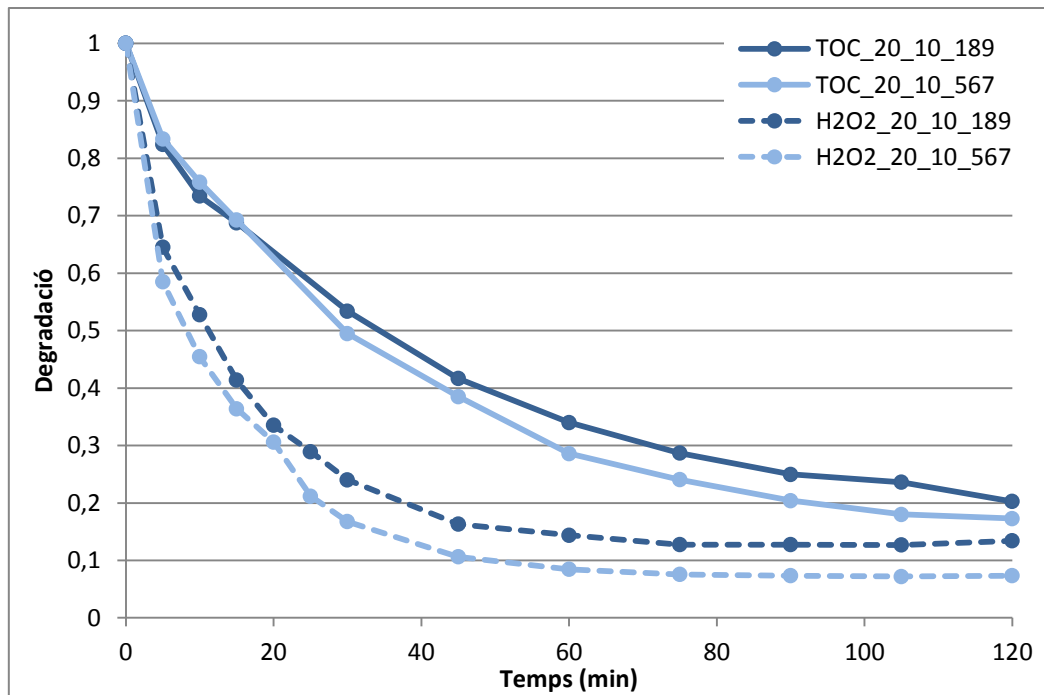
**Figura 16.** Variació del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dels experiments a 40ppm de PCT.

Les conclusions que s'extreuen són les següents:

- L'experiment amb menys peròxid és el que proporciona una menor degradació, sent aquesta del 46% mentre que les de 378ppm i 645,29ppm arriben totes dues a un valor semblant, 72% i 75% respectivament.
- Si tant l'experiment de peròxid central com el d'una quantitat molt més elevada acaben donant rendiments semblants, s'escull el de 378ppm com a òptim ja que, permet estalviar reactiu i reduir costos.
- La quantitat de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> que es consumeix al tenir 110,71ppm es manté constant aproximadament a partir dels 40'. Mentre que els altres dos casos segueix reaccionant fins als 100'.

#### 4.2.2. 4.2.2 Paracetamol constant a 20ppm

En aquest cas es realitzen dos experiments a 20ppm, un amb 189ppm de peròxid i l'altre amb 567ppm.



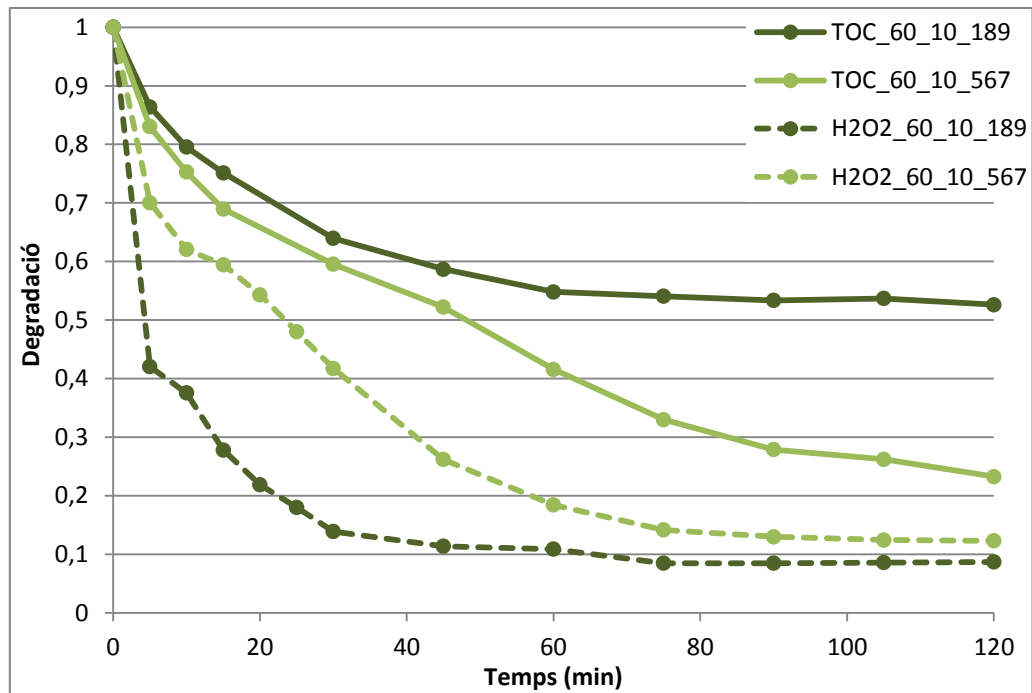
**Figura 17.** Variació del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dels experiments a 20ppm de PCT.

D'aquest experiment podem extreure les següents conclusions:

- 20 ppm de PCT, una concentració relativament baixa, amb 189ppm de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> és suficient per aconseguir una degradació del 80%. La diferència en triplicar el gast de peròxid fins a 567ppm no és significativa ja que és només d'un 2% més.
- S'observa que tant l'evolució del peròxid com la del TOC en ambdós experiments tenen una cinètica semblant.
- La degradació final de peròxid sí és més discrepant en els dos experiments en comparació amb la del TOC. És cert que s'obté una major eficiència amb 567ppm però igualment no compensa.

#### 4.2.3. 4.2.3 Paracetamol constant a 60ppm

Els experiments realitzats amb 60 ppm de paracetamol són realitzats amb les mateixes quantitats de peròxid que en el cas anterior. Més endavant es compararan a diferents concentracions de peròxid constant. Però primerament s'analitza l'experiment de major contaminació en paracetamol.



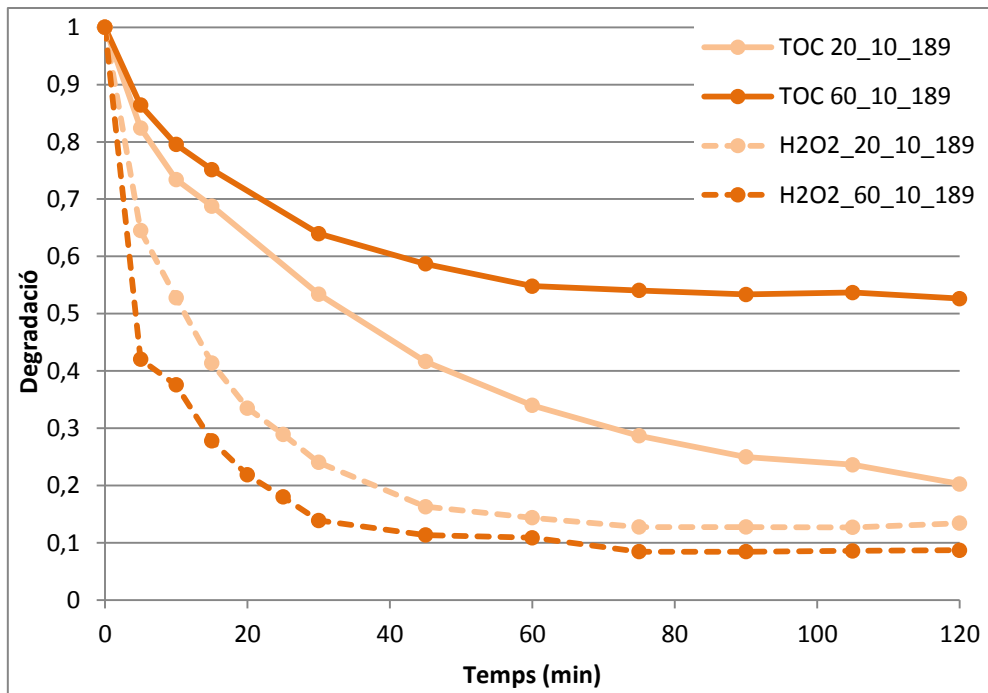
**Figura 18.** Variació del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dels experiments a 60ppm de PCT.

En aquest cas les conclusions extretes són les següents:

- Una concentració de 189ppm de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> no és suficient per degradar una mostra de 60ppm de PCT. La degradació de la matèria orgànica total és del 47% al final de l'experiment, consumint gran part del peròxid, 91%.
- En el cas de triplicar la concentració de peròxid sí s'obté una reducció més alta, del 76%.
- La concentració de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> és manté constant a partir dels 60 minuts aproximadament, per a 189ppm, perquè ja ha reaccionat tot. Mentre que en l'altre cas s'esgota més tard al haver més quantitat per reaccionar.

#### 4.2.4. Peròxid constant a 189ppm

En el cas de mantenir constant la dosi de peròxid d'hidrogen i variar la concentració de contaminant de 20ppm a 60ppm:

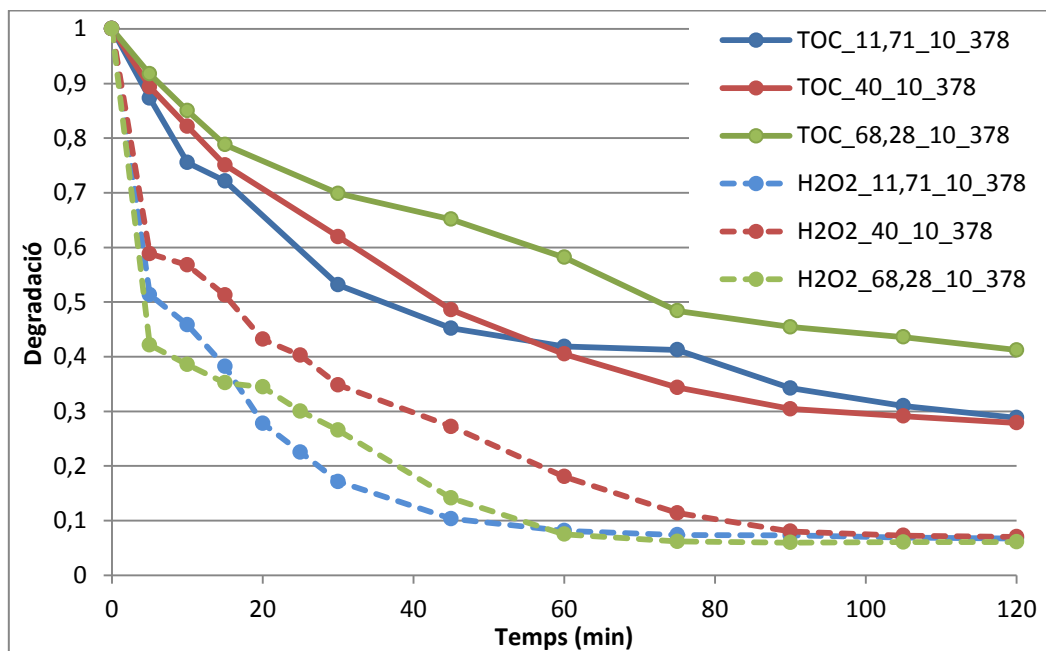


**Figura 19.** Variació del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dels experiments a 189ppm de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

- Per a la baixa concentració de paracetamol 189ppm sí són suficients per reduir el TOC en un 80%, mentre que per a 60ppm de PCT no. El rendiment llavors és del 46%, per tant no hi ha suficient peròxid per degradar tot el paracetamol.
- En tots dos casos cap a l'hora de l'experiment, el peròxid ja ha reaccionat quasi tot amb el paracetamol. En el cas de 20\_10\_189 ocorre perquè hi ha poc peròxid i a la vegada poc paracetamol. Mentre que en el 60\_10\_189, interaccionen durant la primera hora i després s'atura la reacció per la falta de peròxid.

#### 4.2.5. Peròxid constant a 378ppm

La concentració de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> és la del experiment central: 378ppm. Es compara el central amb dos altres casos, un amb més paracetamol i un altre amb menys.

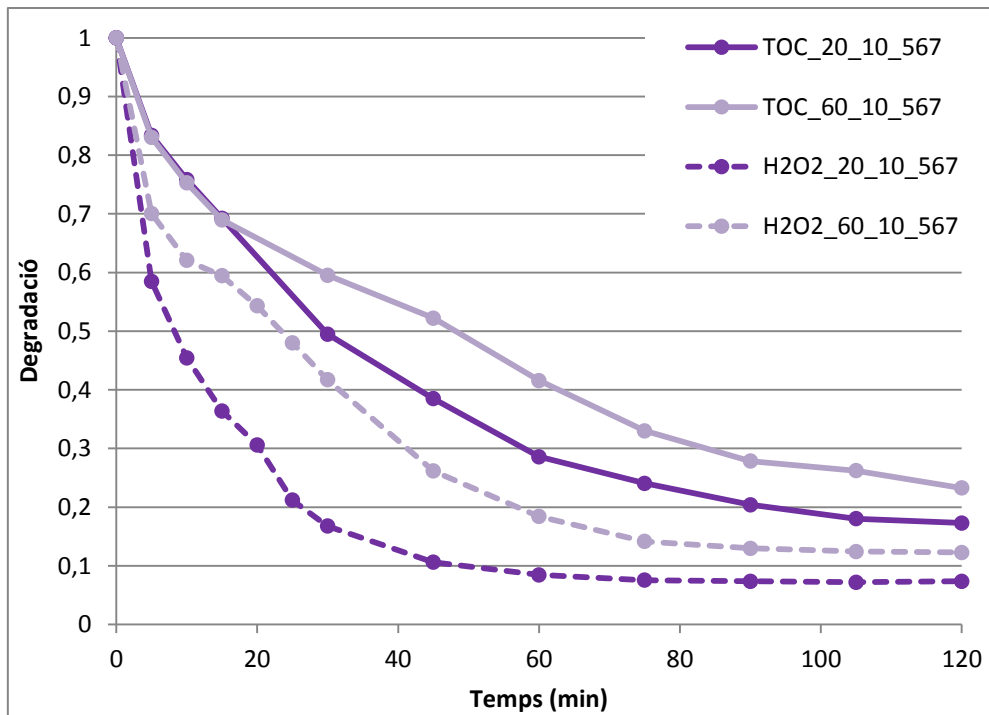


**Figura 20.** Variació del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dels experiments a 378ppm de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

- Com es pot observar a la gràfica 17, la degradació del TOC al final de l'experiment és igual en el cas de tenir 40 o 11,71 ppm de PCT. Mentre que per degradar 68,28ppm de PCT caldria més peròxid per obtenir menys contaminant al final de l'experiment.
- En tots els casos el peròxid es consumeix del tot, fent-ho de manera més ràpida en el cas de tenir menys paracetamol però també en el cas de tenir 68,28ppm de PCT perquè s'esgota al arribar a la hora i no pot continuar degradant més contaminant.

#### 4.2.6. Peròxid constant a 567ppm

Quan la concentració de peròxid és constant a 567ppm i les variacions de contaminant són de 20ppm i 60ppm es fa la mateixa comparació que en el cas de 189ppm. A continuació es comprova si els resultats són els mateixos i les conclusions que s'extreuen.



**Figura 21.** Variació del TOC i del H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dels experiments a 567ppm de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

En tots dos casos s'observen rendiments de degradació tant de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> com de TOC semblants. Les variacions són molt poc discrepants i potser en el cas de 60ppm de PCT es podria haver continuat l'experiment més temps per comprovar si el TOC continuava descendent ja que encara quedava cert peròxid per degradar (menys d'un 15% però del 567ppm potser era suficient per degradar més matèria)

### 4.3. Estudi de ratis

Un rati és la relació entre dues variables que intervenen en un procés. En aquest cas es realitza un estudi de ratis que depèn de la concentració del peròxid entre la concentració de paracetamol.

$$\text{Rati} = \frac{[\text{H}_2\text{O}_2]}{[\text{PCT}]} \quad [15]$$

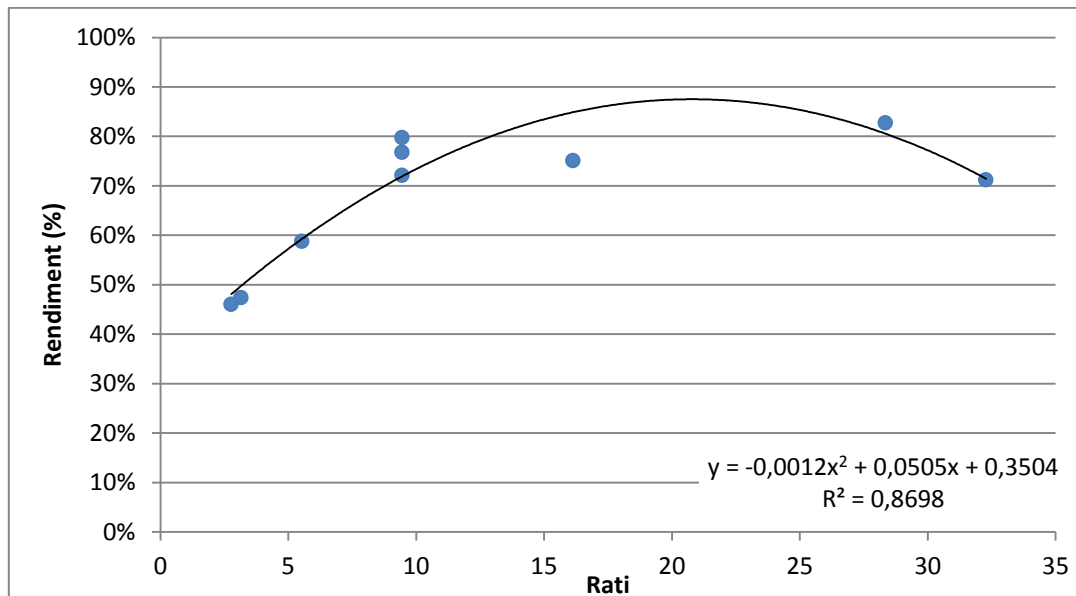


De cadascun dels experiments realitzats es pot extreure el seu rati i comparar-lo amb el rendiment obtingut, és a dir, la quantitat final de degradació de TOC. La taula següent mostra els ratis obtinguts.

**Taula 7.** Dades per determinar l'estudi de ratis.

EXPERIMENT	RATI H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> /PCT	DEGRADACIÓ (%)
20_10_189	9,45	79,74%
60_10_189	3,15	47,38%
20_10_567	28,35	82,72%
60_10_567	9,45	76,74%
40_10_378	9,45	72,11%
11,71_10_378	32,28	71,18%
68,28_10_378	5,54	58,78%
40_10_110,71	2,77	46%
40_10_645,29	16,13	75,09%

Per veure-ho de manera més entenedora i clara és millor representar-los en format gràfic, relacionant les variables de la taula anterior tenint en compte que són a concentració de ferro constant 10ppm.



**Figura 22.** Estudi de ratis segons [H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>] i [PCT].

Tal i com es pot observar, l'experiment 40\_10\_645,29 té un rati que es desvia bastant de la tendència polinòmica de segon grau. Si es menysprea aquest valor, la tendència millora significativament, obtenint una recta d'equació i error igual a:

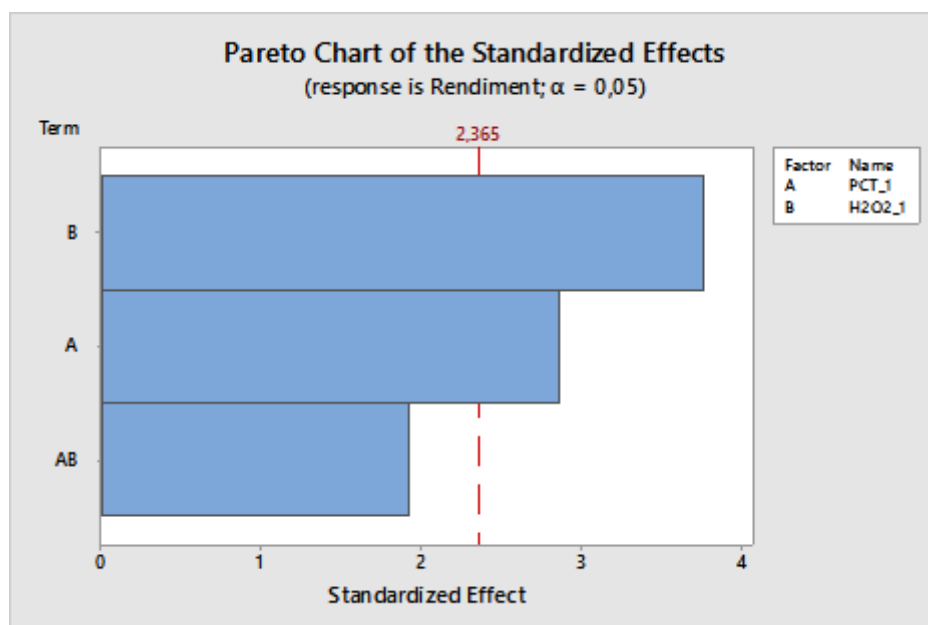
$$Y = -0,0016x^2 + 0,0651x + 0,2872$$
$$R^2 = 0,9776 \quad [16]$$

El rendiment dels experiments millora en augmentar el rati d'aquest fins a un cert punt on aconsegueix un pic, vora un rati de 20. A partir de llavors, el rendiment descendeix

## 4.4. Anàlisi estadístic

Es realitza un anàlisi estadístic dels resultats obtinguts mitjançant la planificació factorial per comprovar que les variables que han estat modificades al llarg del projecte siguin realment rellevants en el procés. Es du a terme amb el programa Minitab i tot i que el programa permet estudiar molts factors de manera econòmica, a continuació se'n mostren els que s'ha cregut més interessants:

### 4.4.1. Gràfic Pareto d'efectes estandarditzats



**Figura 23.** Gràfic Pareto del disseny experimental.

Aquest gràfic mostra els factors que més influència tenen en el sistema: la concentració de  $H_2O_2$  principalment i després la concentració de paracetamol, tot i que amb menor importància també apareix la interacció entre elles. Un exemple d'aquesta última influència és un assaig amb molta concentració de paracetamol i molt poca de  $H_2O_2$  que aconsegueix un rendiment baix. Aquests resultats s'han obtingut tenint en compte les variables d'estudi del projecte i els rang en les que s'han utilitzat.

A més a més, la planificació d'experiments permet generar un model empíric a partir de la metodologia de superfície de resposta segons la influència de les variables en els resultats. En aquest cas s'ha realitzat el model i es comprova testejant les diferents tendències per defecte del Minitab que ninguna té una gran capacitat de predicció. Caldria realitzar un estudi més ampli i detallat per obtenir dades fiables i determinar quin és el model empíric més adient, però a continuació igualment s'inclouen els resultats de les millors prediccions.

L'equació general en la que es basen els models que s'expliquen a continuació és la següent:

$$Y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_{11} \cdot x_1^2 + b_{22} \cdot x_2^2 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \quad [17]$$

On:

$Y$  = resposta experimental = rendiment

$b_0$  = estimació de la mitja global de les mostres

$b_1$  i  $b_2$  = estimació dels efectes principals

$b_{11}$ ,  $b_{22}$  i  $b_{12}$  = estimació dels efectes per interacció

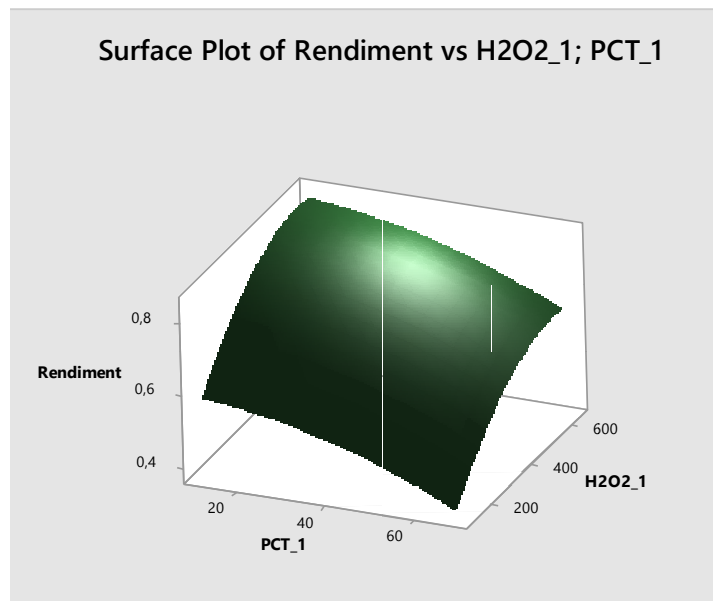
$x_1$  i  $x_2$  = factors no codificats

Cal dir que el model empíric lineal queda descartat al obtenir un error del 67,79%, els resultats es poden veure a l'annex X.

#### Model lineal + Quadràtic

Aquest model presenta un error més fiable que el lineal però tot i així és un error massa gran, 73,71%. L'equació del model ve determinada per:

$$Y = 0,454 + 9 \cdot 10^{-5} \cdot \text{PCT}_1 + 1,334 \cdot 10^{-3} \cdot \text{H}_2\text{O}_2 - 4,5 \cdot 10^{-5} \cdot \text{PCT}_1^2 - 1 \cdot 10^{-6} \cdot \text{H}_2\text{O}_2^2$$

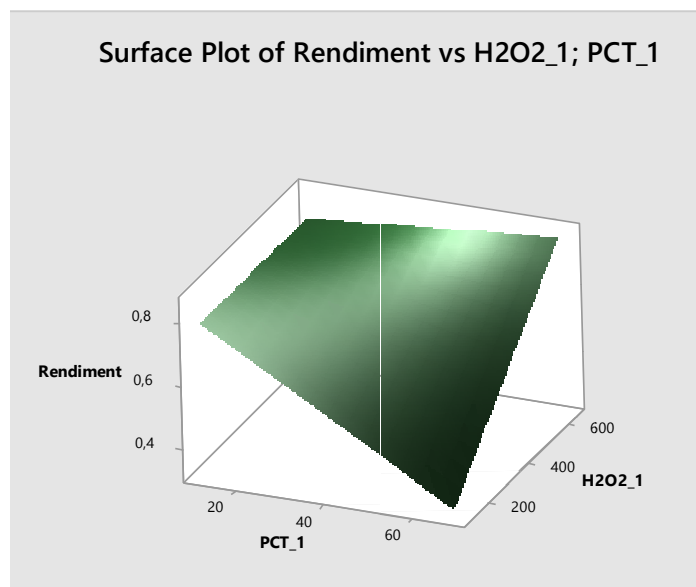


**Figura 24.** Gràfic de superfície model empíric 1.

#### Model lineal + Interacció

Aquest model presenta un error semblant a l'anterior, del 78,86%. La seva equació ve determinada per:

$$Y = 0,908 + 1,01 \cdot 10^{-2} \cdot \text{PCT}_1 + 2,12 \cdot 10^{-4} \cdot \text{H}_2\text{O}_2 - 1,7 \cdot 10^{-5} \cdot \text{PCT}_1 \cdot \text{H}_2\text{O}_2 \quad [18]$$



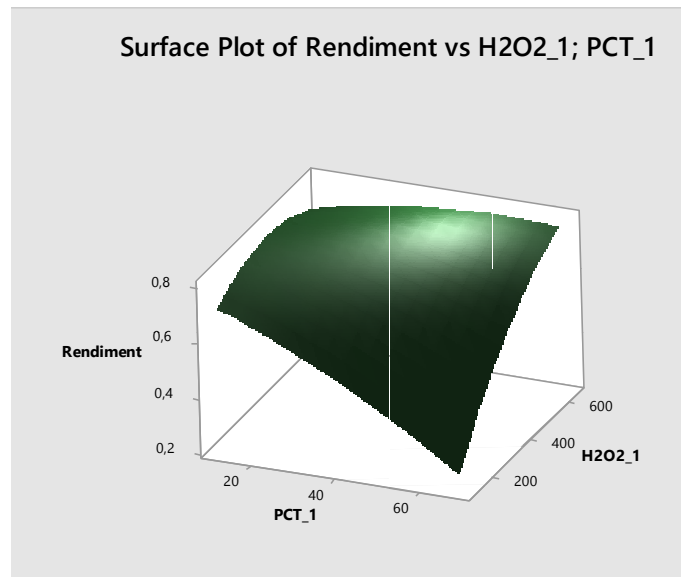
**Figura 25.** Gràfic de superfície model empíric 2.

### Model Full square

Aquest model és el que presenta un error més proper a la unitat: 84,78%.

La seva equació ve determinada per:

$$Y = 0,718 + 6,51 \cdot 10^{-3} \cdot \text{PCT}_1 + 6,36 \cdot 10^{-3} \cdot \text{H}_2\text{O}_2_1 - 4,5 \cdot 10^{-5} \cdot \text{PCT}_1^2 - 1 \cdot 10^{-6} \cdot \text{H}_2\text{O}_2_1^2 + 1,7 \cdot 10^{-5} \cdot \text{PCT}_1 \cdot \text{H}_2\text{O}_2_1 \quad [19]$$



**Figura 26.** Gràfic de superfície model empíric 2.

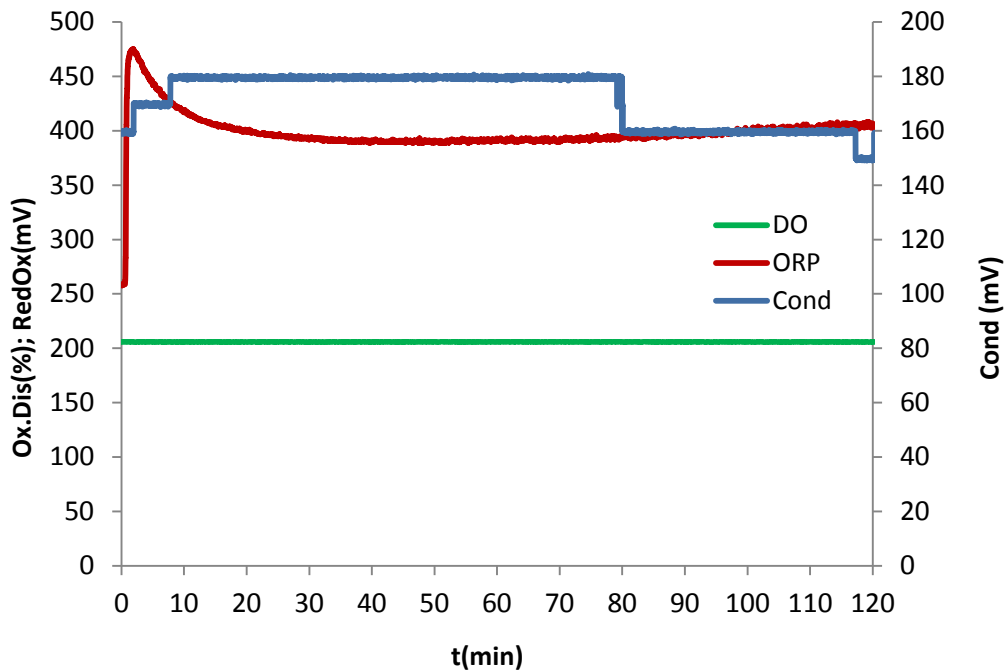
Després d'analitzar els tres models i veure que cap d'ells genera resultats satisfactoris, es deixa com a proposta de millora: analitzar amb deteniment un model adequat per al procés de degradació del paracetamol mitjançant la reacció foto-fenton.

## 4.5. Variables online

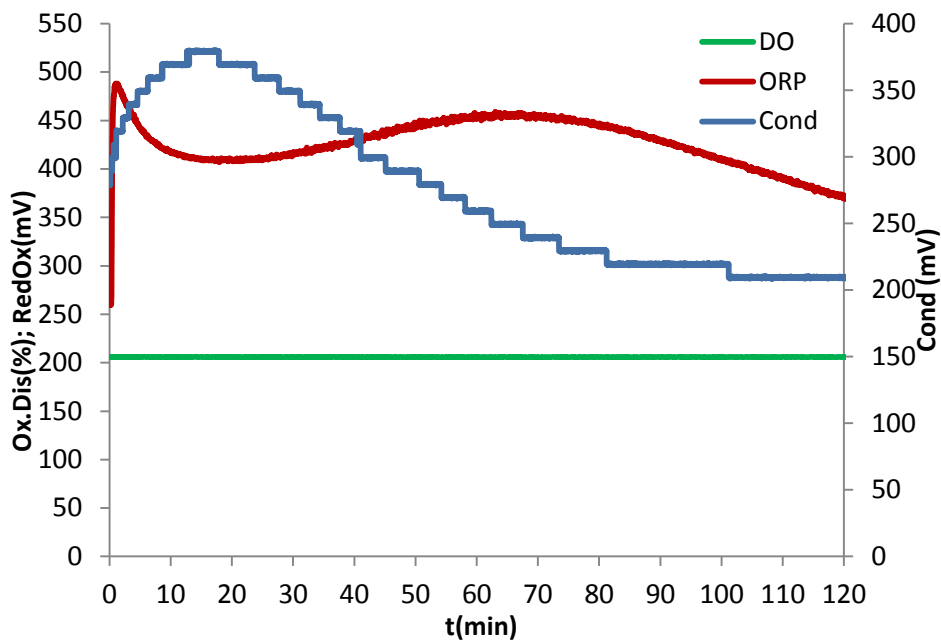
Les variables online registrades pels diferents sensors de la planta serveixen per determinar que els paràmetres de la recció com la temperatura, el pH, el cabal de recirculació o el de la presa de mostra són els adequats i l'experiment s'ha dut a terme les condicions adients. A més a més permet

valorar l'evolució de la conductivitat, del potencial redox i de la demanda d'oxigen.

A continuació es mostra la comparació entre les variables online de la reacció Fenton i la Foto-Fenton:



**Figura 27.** Gràfic variables online reacció Fenton.



**Figura 28.** Gràfic variables online reacció FotoFenton.

Les gràfiques 23 i 24 mostren el comportament de les variables online de les reaccions. En la primera es pot observar com el potencial redox augmenta ràpidament al inici del experiment, al afegir el  $H_2O_2$ , però que a la mitja ja es manté contant i no presenta més variacions. En la fotofenton el comportament del potencial inicial és similar tenint un pic fins a concentracions de 475mV en tots dos casos, però sembla que després s'estabilitza durant un cert temps per demostrar un lleuger creixement cap a la hora d'experiment i acabar vora el 370mV quan la Fenton ho fa als 160mV. Les variacions de les conductivitats en els dos casos són molt diferents. Mentre el Fenton comença i acaba amb una conductivitat vora els 160nS, tenint un pic esglaonat entre els 10 i els 80 minuts el qual augmenta fins 180nS, el fotofenton inicialment està a 280nS i va augmentant gradualment en intervals menors de 5 minuts per trobar el pic a 370nS als 15 minuts i anar decreixent fins al valor inicial.

L'estudi de l'oxigen dissolt no és el mostrat en les gràfiques anteriors, el sensor està configurat de manera que si detecta una mesura per sobre del 200% no l'enregistri amb el seu valor real sinó com al del límit nombrat. Al inici dels experiments es va detectar un problema amb aquest i des de llavors ha mesurat valors molt dispars entre el 80% i 3000%, així que no se n'ha pogut determinar la seva evolució.

# **CAPÍTOL 5: AVALUACIÓ ECONÒMICA**



En aquests apartat es detallen les despeses ocasionades pel projecte. S'inclouen els costos dels reactius i del material utilitzat, els energètics i els de l'aigua requerida, el salari dels treballadors que el desenvolupen i es calcula el cost de l'amortització dels aparells. Tot aquest conjunt pot dividir-se en quatre subapartats:

- Costos materials
- Costos energètics
- Costos personals
- Amortitzacions

## 5.1. Costos materials

Inclouen els costos dels reactius identificats a la Taula 3, i també els costos de material de laboratori, presentats a la taula 4:

**Taula 7.** Cost dels reactius utilitzats.

Reactiu	Quantitat	Preu (€/ampolla)
Paracetamol	1000g	49,95
Peròxid d'Hidrogen (33%)	1 L	8,25
Sulfat de Ferro (II)	500g	26,87
Vanadat (98,5%)	250g	138,51
Àcid Clorhídric	1 L	16
Hidròxid de sodi	1 L	17,5
TOTAL = 257,08€		

El cost dels reactius utilitzats en el projecte ve donat pel preu de les ampolles necessàries, això vol dir que com a màxim s'hab utilitzat les quantitats mostrades anteriorment.

**Taula 8.** Cost del material de laboratori.

Material	Unitats	Preu/unitat	Cost total
Vas de precipitats 600mL	1	10,51€	10,51€
Vas de precipitats 250mL	2	6,67€	13,34€
Pipeta 5 mL	1	8,80€	8,80€
Pipeta aforada 25mL	1	7,77€	7,77€
Matràs aforat 5L	3	226,18€	678,54€
Matràs aforat 10mL	13	8,95€	116,35€
Matràs aforat 100mL	7	16,22€	113,54€
Matràs aforat 1L	1	32,89€	32,89€
Cubetes	2	69,50€	139€
Pipeta automàtica 100µL	1	212,5€	212,5€
Pipeta automàtica 20µL	1	175€	175€
Sabata per pesar	1	11,1€	11,1€
Puntes micropipetes	5	4,3€/caixa	4,3€
Comptagotes	2	3,1€/caixa	3,1€
Cronòmetre	1	9,1€	9,1€
Tubs centrífuga	13	130€/caixa	130€
Embut de plàstic gran	1	15€	15€
Espàtules	2	11,20€/caixa	11,20€
Flascó rentador	2	11,50€	23€
TOTAL = 1692,04€			

El cost total del material i els reactius és la suma dels valors totals de les taules 3 i 4.

**Taula 9.** Costos totals de material.

Cost Reactius	257,08€
Cost Materials	1692,04€
<b>TOTAL</b>	<b>1949,12€</b>

## 5.2. Costos energètics

Els costos energètics de qualsevol projecte venen determinats per la següent equació:

$$\text{Cost energètic} = \frac{\text{CostVariable} + \text{CostFix}}{\text{Consum}} \quad [8]$$

Com el cost fix sempre és el mateix i l'activitat del projecte es du a terme per la universitat, no es té en consideració en l'avaluació econòmica ja que és l'entitat la que se'n fa càrrec. Per tant, es procedeix a determinar els costos variables, que inclouen la despesa pel consum elèctric de la maquinària i el cost de l'aigua dels experiments i de la de rentat:

**Taula 10.** Costos del consum elèctric..

Aparell	Pot (kw)	Temps fun. (h)	Cost €/kw·h
Planta Pilot	0,3	98	2,84
Analitzador TOC	1,2	84	9,75
Espectrofotòmetre	0,25	10	0,24
Agitador magnètic	0,05	10h 30'	0,05
Llum 300 W	0,3	56	1,62
Sistema monitorització	0,1	98	0,95
Balança de precisió	0,01	5	0,005
Nevera	0,1	1400	13,54
<b>TOTAL = 28,99€</b>			

En la taula anterior, es calcula el cost energètic de cada aparell tenint en compte el seu temps de funcionament, la seva potència i multiplicant pel cost en euros del kilowatt\*hora. Aquest últim paràmetre és igual per tots els aparells ja que ve determinat per la companyia elèctrica i el seu valor és igual a 0,0966€/kw·h.

El cost de l'aigua es calcula comptabilitzant l'aigua miliQ, la destil·lada i la de la xarxa utilitzades tant pels experiments com per la neteja. Si es

realitzen 28 experiments, de 15L d'aigua destil·lada cadascun i després s'omple la planta novament per fer-ne la segona neteja, significa que es gasten 840 litres d'aigua destil·lada i se n'aproximen uns 100 litres més per la neteja del material. a més a més, cal tenir en compte l'aigua miliQ utilitzada en el TOC, de la qual se'n gasta uns 4 litres, a part dels 420 litres d'aigua de xarxa utilitzats per la primera neteja de la planta pilot. El cost total de l'aigua es pot observar a la taula 7:

**Taula 11.** *Costos generats pel consum d'aigua.*

Aparell	Volum (L)	Cost (€/L)	Cost (€)
H2O destil·lada	940	0,15	141
H2O MiliQ	4	0,5	2
H2O de xarxa	420	0,001	0,42
<b>TOTAL= 143,42€</b>			

### 5.3. Costos personals

El càlcul dels costos de personal es calculen de manera orientativa com si el projecte l'estigués realitzant una empresa. El personal que hi treballa és un director de projecte i un enginyer tècnic, encarregat de la realització dels experiments. Els costos es calculen depenent de les hores treballades, del salari anual (SBA), de la cotització a la seguretat social (SS) i dels recursos humans destinats a cadascun (RH):

$$\text{Cost personal} = \text{RH} \cdot (\text{SBA} + \text{SS}) / \text{hores treballades/any}$$

S'estima una dedicació de 1000 hores anuals per projecte i per treballador. Comptant que hi ha dos treballadors caldrà aplicar la formula per duplicat:

**Taula 12.** Costos personals dels treballadors.

	RH (€/any)	SBA	SS	Cost personal
Director projecte	50	24000	32%	1584€
Enginyer tècnic	800	20000	32%	21120€

Per tant, els costos personal són un total de **22704€**.

## 5.4. Amortitzacions

Es considera que es pot amortitzar tot aparell que suposi un cost major a 450€, segons la política de l'escola. En aquest cas, s'inclouen els aparell utilitzats, ja que són els únic que comporten un gas superior.

**Taula 13.** Cost dels aparells a amortitzar.

Equip	Preu
Planta Pilot	9000€
Analitzador TOC	23400€
Espectrofotòmetre	3850€
Sistema monitorització	12000€
Balança de precisió	1000€
Nevera	1200€
TOTAL = 50450 €	

El càlcul de les amortitzacions es du a terme comptabilitzant que el valor residual dels equips és nul, ja que seran utilitzats fins acabar la seva vida útil, aproximadament s'ha considerant de 15 anys.

$$Amortització = \frac{Cost}{Vida\ util} = \frac{50450\ €}{15\ anys} = 3363,33€$$

Per determinar els costos totals del projecte es fa la suma dels presentats anteriorment que queden resumits a la següent taula:

**Taula 14.** *Resum dels costos totals del projecte.*

Cost de material	1949,12€
Cost energètic	28,99€
Cost consum aigua	143,42€
Cost personal	22704€
Cost amortització	3363,33€
<b>TOTAL</b>	<b>28188,86 €</b>

El projecte té una despesa de 28188,86€.



# **CAPÍTOL 6: CONCLUSIONS**



## 6.1. Conclusions del projecte

Seguidament es presenten les conclusions extretes un cop realitzat el projecte:

- ✓ Es coneix la instrumentació de la planta i la seva monitorització, que permet fer el seguiment de la reacció amb les variables online.
- ✓ Els mètodes analítics són adequats per la determinació del TOC i del  $H_2O_2$ . Prèviament s'han realitzat les corresponents rectes de calibratge.
- ✓ Les dades experimentals es recullen amb la major precisió possible per evitar errors de mesura, tot i que com s'observa en els resultats experimentals sempre existeix un error mínim. Una possible causa seria un TOC elevat en l'aigua destil·lada (al haver-hi hagut problemes amb les resines).
- ✓ Les variables online permeten: determinar en quin punt acaba la degradació del peròxid, observar com evoluciona el potencial d'oxidació-reducció (sempre positiu ja que es du a terme una oxidació) i l'estudi de la conductivitat al llarg de la reacció.
- ✓ Els estudis preliminars permeten:
  - Determinar la dependència del procés amb la radiació ultraviolada i la concentració dels reactius, tant del ferro com del peròxid d'hidrogen.
  - Verificar que les reaccions Fenton i foto-Fenton són adients per la degradació del contaminant escollit, el paracetamol.
  - Modelar un disseny experimental.
- ✓ La comparació entre els dos processos d'oxidació determina que la reacció Fenton és més lenta i presenta un rendiment menor que la foto-Fenton, sent aquestes del 55% i 72% respectivament.
- ✓ L'estudi de ratis permet observar el percentatge de degradació del contaminant segons la quantitat de  $H_2O_2$  i de paracetamol afegida inicialment. Aquest mostra que l'experiment amb un major rendiment és el de 20ppm de PCT i 189ppm de  $H_2O_2$  obtenint una degradació del 79,74%.

- ✓ S'aconsegueixen rangs de concentració finals establerts dins les normatives, per tant es realitzen els experiments tenint cura del medi ambient.
- ✓ Es determinen les variables influents de la reacció. La concentració de  $H_2O_2$  és la que fa variar més els resultats, seguida de la concentració de PCT i per últim la combinació de les dues.
- ✓ El model empíric obtingut del tractament estadístic del disseny d'experiments únicament permet estimar-ne la resposta. Caldria validar-lo per tal de poder-se utilitzar com a model empíric predictiu de la resposta.

## 6.2. Propostes de millora

Després d'analitzar les conclusions i veure els objectius aconseguits, es determina un seguit de variacions que podrien completar i enriquir el projecte:

- ✓ Realitzar els experiments a diferents temperatures, ja que la planta disposa dels elements necessaris.
- ✓ Dosificar el peròxid d'hidrogen en el temps per veure l'evolució de la degradació i si fos necessari allargar l'experiment.
- ✓ Fer variacions en les concentracions de ferro per comprovar la influència en el procés.
- ✓ Variar la radiació utilitzada, provar diferents làmpades i de diverses freqüències.
- ✓ En alguns experiments amb molta quantitat de contaminant i de peròxid, deixar reaccionar mínim mitja hora més.
- ✓ Mesurar la concentració exacte de paracetamol mitjançant HPLC, per verificar la seva degradació, a més a més de la general amb el TOC.
- ✓ Realitzar experiments nous a diferents rang per verificar l'estudi de ratis i la planificació factorial.



# **CAPÍTOL 7:**

# **BIBLIOGRAFIA**

## 7.1. Referències bibliogràfiques

AMB. Reglament metropolità d'abocament d'aigües residuals. Butlletí Oficial de la Província de Barcelona. 2015. Barcelona.

Domènech, Xavier; F. Jardim, Wilson; I. Litter, Marta. Procesos avanzados de oxidación para la eliminación de contaminantes. Proyecto CNEA-CAC-UAQ #95-Q-03-05. Argentina.

FEMTO Indústria e Comércio de Instrumento. Espectrofotómetro Cirrus 60SA. <http://www.femto.com.br/esp/espectrofotometro-cirrus-60SA.html> (Consultada 10 Abril, 2015)

Institut Català de recerca de l'Aigua. Analizador de carbono total orgánico (TOC). Marca Shimadzu. [http://www.icra.cat/files/equipament/SCT-UAQ%2005\\_2.pdf](http://www.icra.cat/files/equipament/SCT-UAQ%2005_2.pdf) (Consultada 06 Abril, 2015).

Marín Loaiza, J. C et al. 2011. Síntesis de fármacos. Síntesis de Acetaminofén. Universidad Nacional de Colombia. (Consultada el 12 Mayo, 2015). [http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/ciencias/2015657/und\\_6/pdf/marco\\_teorico.pdf](http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/ciencias/2015657/und_6/pdf/marco_teorico.pdf)

Moctezuma, Edgar; Leyva, Leyva; Aguilar, Claudia A; Luna, Raúl A.; Montalvo, Carlos. Photocatalytic degradation of paracetamol: Intermediates and total reaction mechanism. Mèxic. 2012

NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods, <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook> (Consultada 25 Maig, 2015)

Prousek, Jousef. 1995. Advanced oxidation processes for water treatment. Bratislava, Slovakia. Chem list 90: 229-237.

Yang L.H., Ying G.G., Su H.C., Stauber J., Adams M. & Binet M. Growth-inhibiting effects of twelve antibacterial agents and their mixtures on the freshwater microalga *Pseudokirchneriella subcapitata*. Environmental Toxicology and Chemistry. 2008.

## 7.2. Bibliografia de recerca

De Laurentiis , Elisa; Prasse, Carsten; Ternes, Thomas A; et al. Assessing the photochemical transformation pathways of acetaminophen relevant to surface waters: Transformation kinetics, intermediates, and modelling. Torino, Koblenz, Clermont. 2014.

Jaen, Esther. Estudi de l'efecte de la dosificació de peròxid d'hidrogen en el procés Fotofenton aplicat a la Tetraciclina. Barcelona. 2011.

Langlais, Bruno; Reckhow, David A.; Brink, Deborah R.: Ozone in water treatment. Application and Engineering. 1991. CRC Press.

Muñoz, I. Life Cycle Assessment as a tool for green chemistry: application to different advanced oxidation processes for wastewater treatment. Tesis doctoral, UAB, Barcelona. (consultada 01 Juny, 2015) [http://www.tesisenxarxa.net/TESIS\\_UAB/AVAILABLE/TDX-0809106-132830//imo1de1.pdf](http://www.tesisenxarxa.net/TESIS_UAB/AVAILABLE/TDX-0809106-132830//imo1de1.pdf)

Pey Clemente, Jaime. Aplicación de procesos de oxidación avanzada (fotocatálisis solar) para tratamiento y reutilización de efluentes textiles. UPV, Valencia.

Khetan, Sushil, K; Collins J, Terrence. Human Pharmaceuticals in the Aquatic Environment: A Challenge to Green Chemistry. Carnegie Mellon University. Pensilvania. 2007

Reina Cabrera, A.; Juanes Santos, L.; Sanchez García, J.L; López Casas, J.L. Modelling the photo-Fenton oxidation of the pharmaceutical paracetamol in water including the effect of photon absorption (VRPA). Almería. 2014

Sanchez Nuñez, Carmen I. Estudi de la degradació de contaminants emergents mitjançant Processos Avançats d'Oxidació (PAOS). Barcelona 2013.

Serra Cluselles, Anna. Estratègies per al tractament d'aigües biorecalcitrants mitjançant processos d'oxidació avançada. 2010. Barcelona.

Vogna, Davide; Mrotta, Raffaele; Napolitano, Alessandra; D'Ischia, Marco. Advanced Oxidation Chemistry of Paracetamol. UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-Induced Hydroxylation/Degradation Pathways and N-Aided Inventory of Nitrogenous Breakdown Products. University of Naples "FedericoII", 2002.

Yamal, E. Modelización y desarrollo de herramientas de soporte a la decisión para la operación eficiente de procesos de oxidación avanzada. Universitat Politècnica de Catalunya. Barcelona, España. 2010



Escola Universitària d'Enginyeria  
Tècnica Industrial de Barcelona  
Consorci Escola Industrial de Barcelona

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

**Volum I**

Annex

TREBALL DE FI DE GRAU



# **"TRACTAMENT DE CONTAMINANTS EMERGENTS AMB PROCESSOS D'OXIDACIÓ AVANÇADA"**

TFG presentat per obtenir el títol de GRAU en  
ENGINYERIA QUÍMICA

Per Ester Parellada Torcal

Barcelona, 09 de Juny de 2015

**Director: Montserrat Pérez Moya**

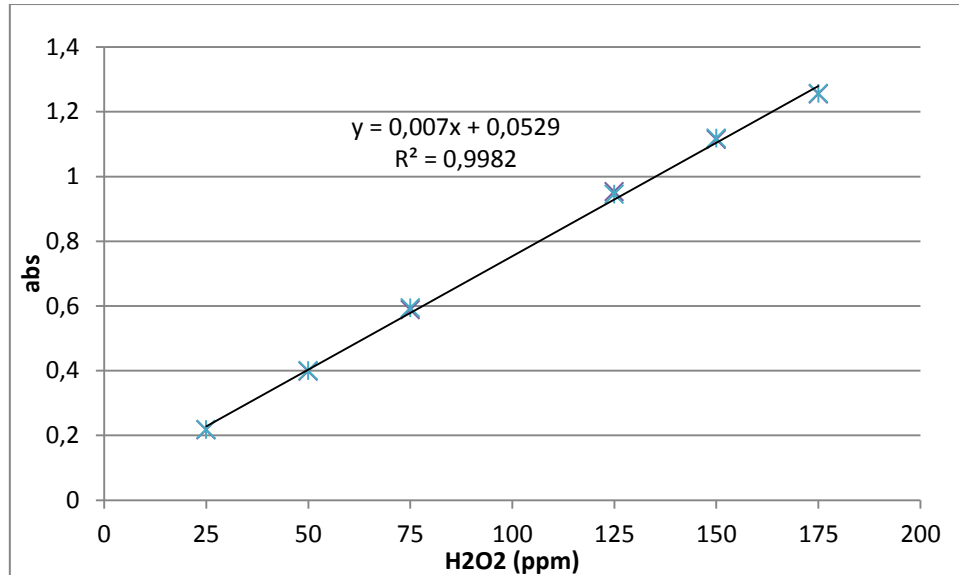
Departament de 713 (EQ)

Universitat Politècnica de Catalunya (UPC)



## 1. RECTA CALIBRATGE PERÒXID

Recta de calibratge del peròxid d'hidrogen.



És una mitja de les 5 rectes obtingudes.

ppm	Mostra 1	Mostra 2	Mostra 3	Mostra 4	Mostra 5
25	0,262	0,269	0,268	0,217	0,218
50	0,452	0,462	0,463	0,398	0,4
75	0,663	0,665	0,667	0,588	0,594
125	1,018	1,016	1,015	0,953	0,945
150	1,126	1,134	1,136	1,114	1,118
175	1,292	1,297	1,297	1,254	1,256

## 2. RECTES DE CALIBRATGE DEL TOC I L'AIGUA DESTIL·LADA

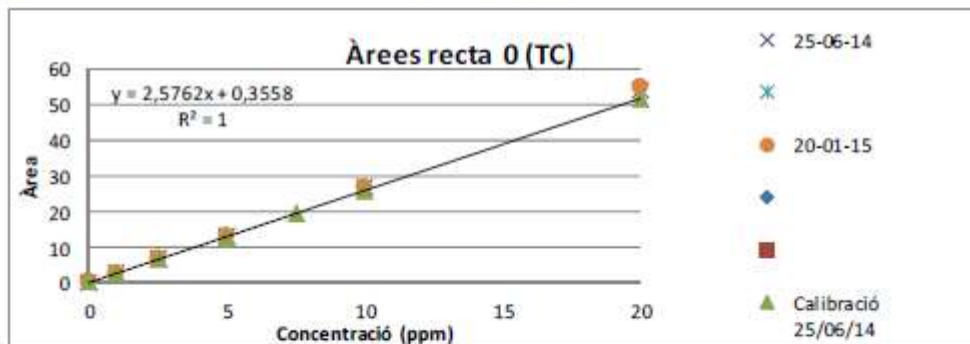
### RECTES TC

Nº recta	Rang (ppm) - [patrons calibració]
0	0 a 20 [0-1-2,5-5-7.5-10-20]
1	0 a 50 [0-5-10-25-40-50]
2	0 a 100 [0-10-25-50-75-100]
3	0 a 50 [0-5-25-40-50]
5	0 a 300 [0-25-100-200-300]
6	50 a 500 [50-100-200-300-400-500]

### RECTES IC

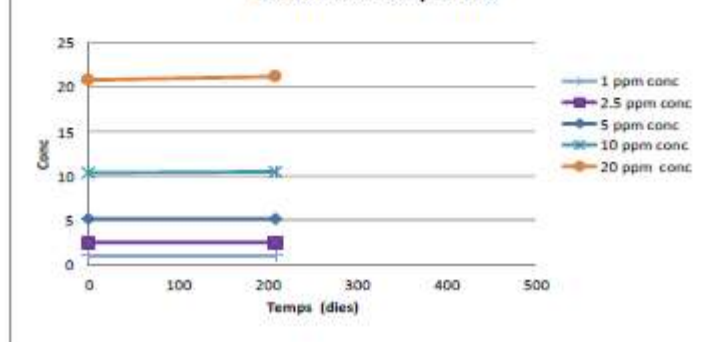
Nº recta	Rang (ppm) - [patrons calibració]
0	0 a 50 [0-5-10-20-40-50]
1	0 a 50 [0-5-10-20-30-40-50]
6	40 a 200 [40-50-100-200]

### RECTA TC nº 0

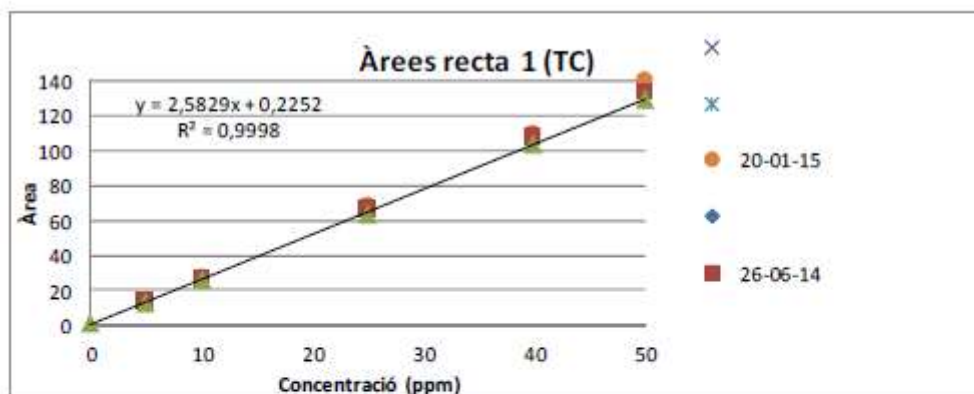


VERIFICACIÓ	Àrea	Concentració	ppm de diferència respecte data calibració	% diferència respecte valors de la data de calibració	% diferència respecte teòric	diferència respecte teòric (ppm)
Data	20-01-15	20-01-15				
Temps que ha passat des de l'anterior (dies)						
	209	209				
0	0,785	0,167				-0,1
1	3,05	1,046	0,0	-0,8	-4,6	0,0
2,5	6,817	2,508	0,1	2,1	-0,3	0,1
5	13,58	5,133	0,0	-0,2	-2,7	0,1
10	27,2	10,42	-0,1	-1,3	-4,2	0,3
20	55,22	21,16	-0,4	-2,0	-5,8	0,8

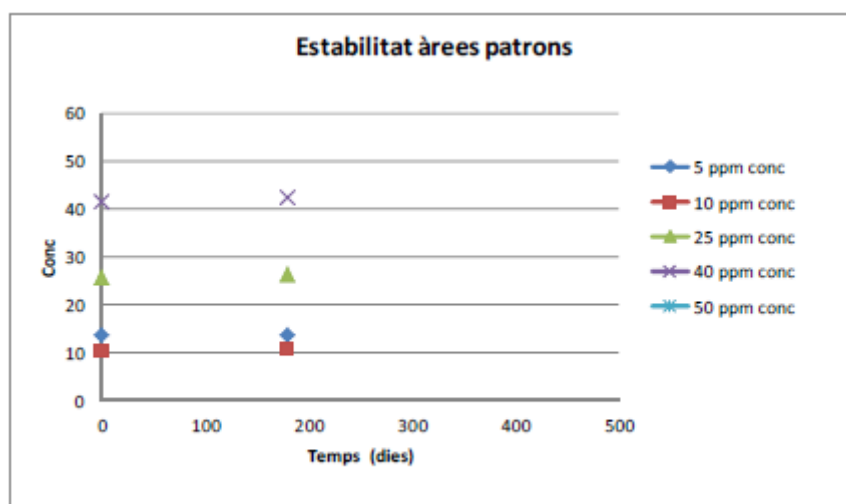
### Estabilitat àrees patrons



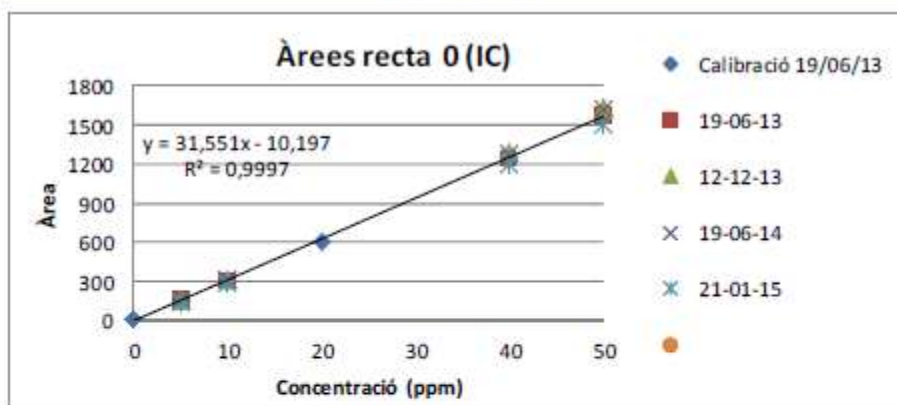
RECTA TC nº 1



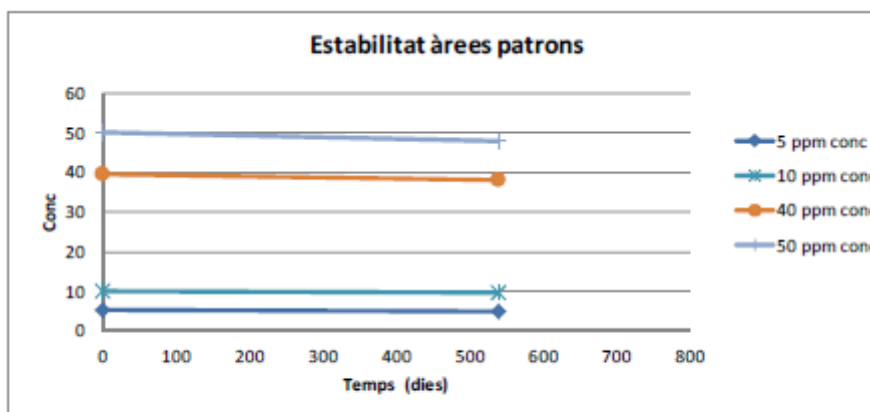
VERIFICACIÓ	Àrea	Concentració	ppm de diferencia respecte data calibració	% diferencia respecte valors de la data de calibració	% diferència respecte teòric	diferència respecte teòric (ppm)
Data	20-01-15	20-01-15				
Temps que ha passat des de l'anterior (dies)	180	180				
5	13,65	5,195	-0,1	-1,2	-3,9	0,1
10	27,32	10,49	-0,3	-2,9	-4,9	0,2
25	67,96	26,22	-0,6	-2,4	-4,9	0,6
40	109,5	42,29	-0,8	-2,1	-5,7	1,5
50	139,86	52,42	-1,0	-2,0	-4,8	1,4



RECTA IC n° 0

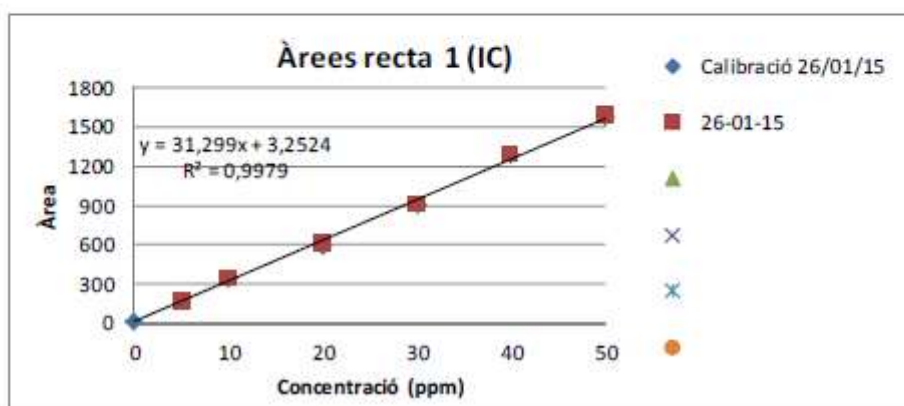


VERIFICACIÓ	Àrea	Concentració	ppm de diferència respecte data calibració	% diferència respecte valors de la data de calibració	% diferència respecte teòric	diferència respecte teòric (ppm)
Data	21-01-15	21-01-15				
Temps que ha passat des de l'anterior (dies)	540	540				
5	146,6	4,97	0,1	1,2	0,6	0,0
10	290,2	9,519	0,4	3,5	4,8	-0,5
40	1193	38,13	1,6	3,9	4,7	-1,9
50	1507	48,08	1,9	3,8	3,8	-1,9



RECTA IC nº 1

Data	Calibració 26/01/15		
Concentració	Àrea	SD	CV (%)
0	5,367	0,08	1,52
5	170,1	0,12	0,07
10	340,4	0,3	0,38
20	595,1	0,3	0,05
30	902,1	1,12	0,12
40	1284	2,65	0,21
50	1577	1	0,06

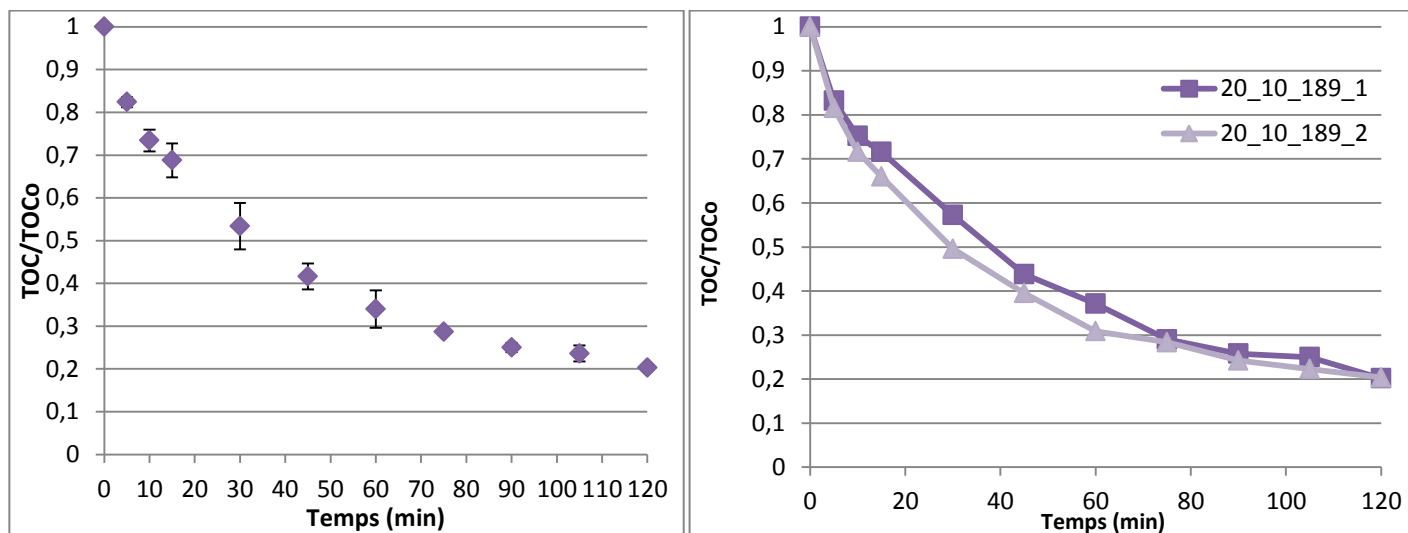


VERIFICACIÓ	Àrea	Concentració	ppm de diferència respecte data calibració	% diferència respecte valors de la data de calibració	% diferència respecte teòric	diferència respecte teòric (ppm)
Data	26-01-15	26-01-15				
Temps que ha passat des de l'anterior (dies)						
	0	0				
5	170,8	5,353	0,0	0,0	-7,1	0,4
10	343,2	10,86	0,0	0,0	-8,6	0,9
20	599,3	19,04	0,0	0,0	4,8	-1,0
30	905,3	28,82	0,0	0,0	3,9	-1,2
40	1295,0	41,26	0,0	0,0	-3,2	1,3
50	1590,0	50,68	0,0	0,0	-1,4	0,7

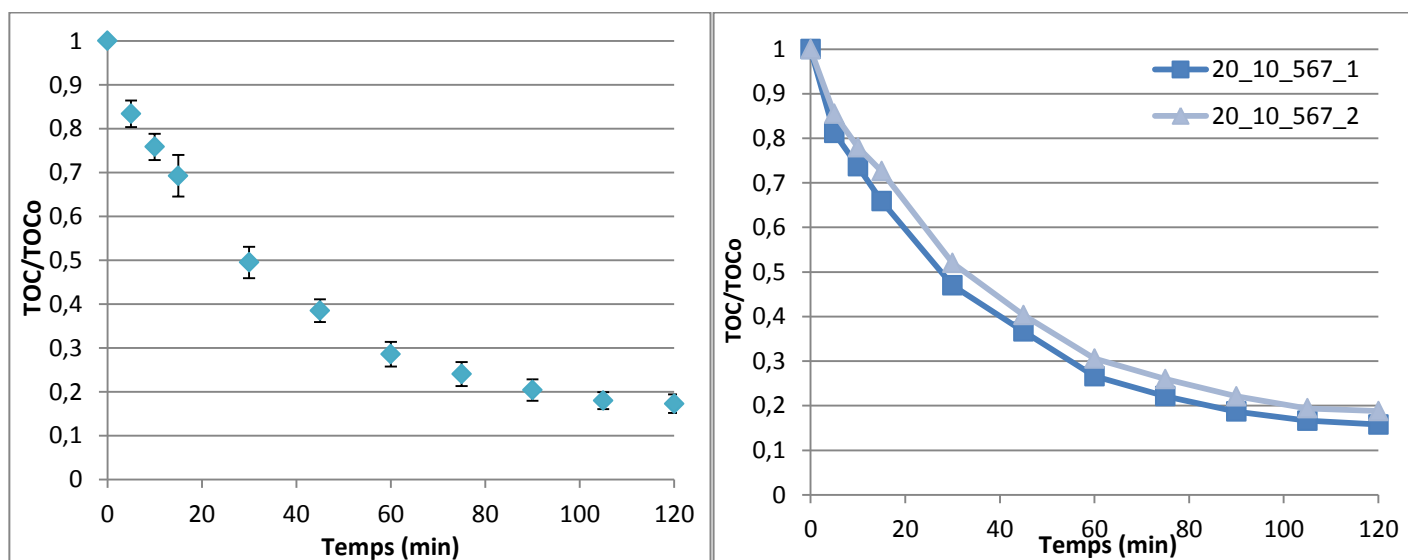
### 3. Valors experimentals

A continuació s'adjunten les gràfiques dels experiments duplicats i les gràfiques de les seves desviacions estàndards.

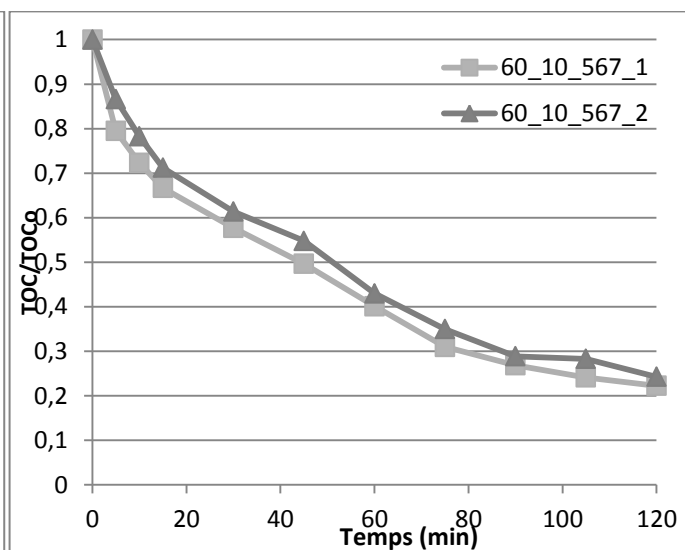
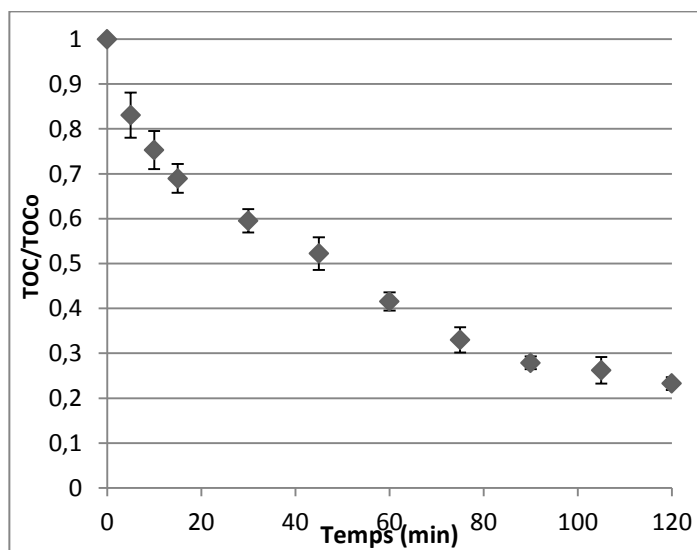
#### - Experiment 20 10 189



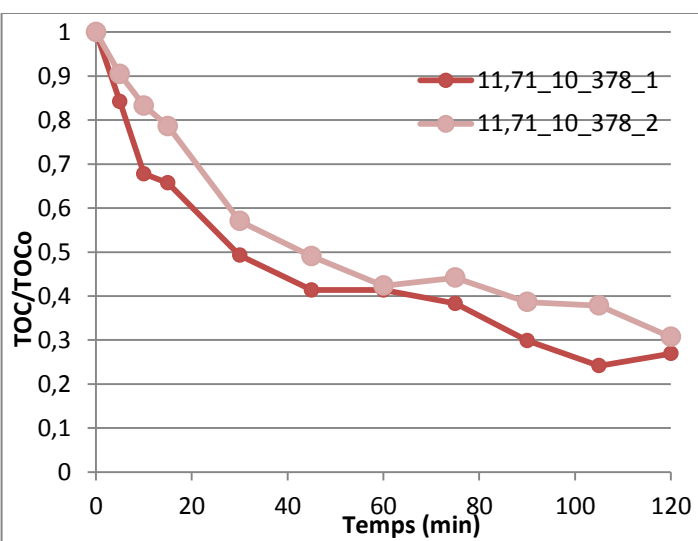
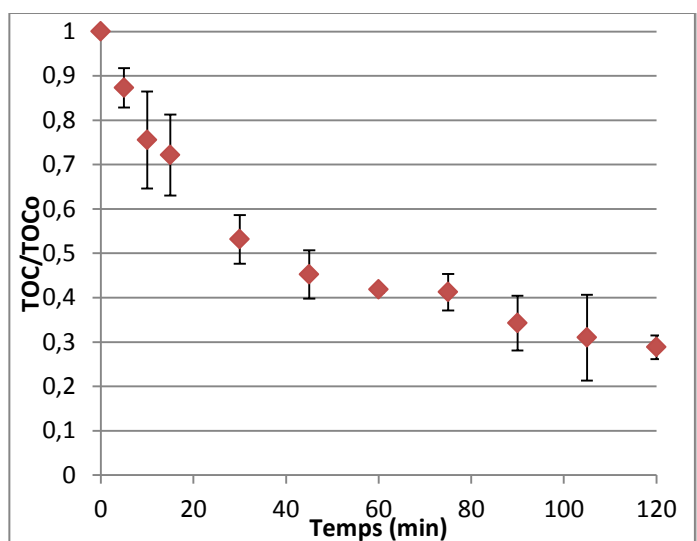
#### - Experiment 20 10 567



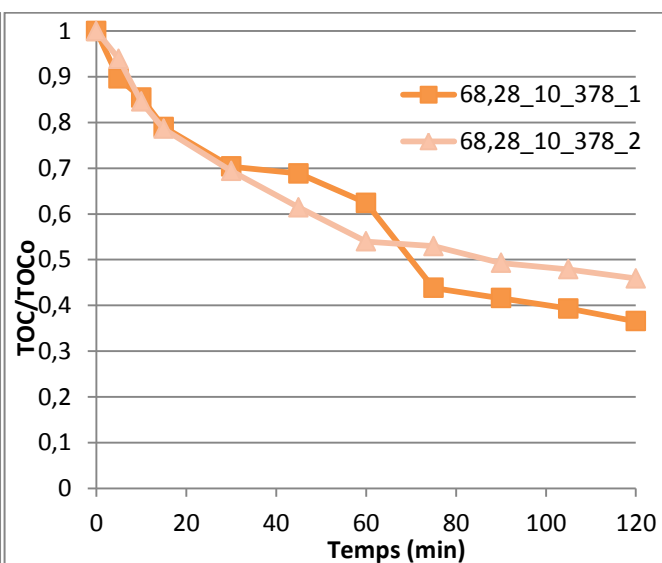
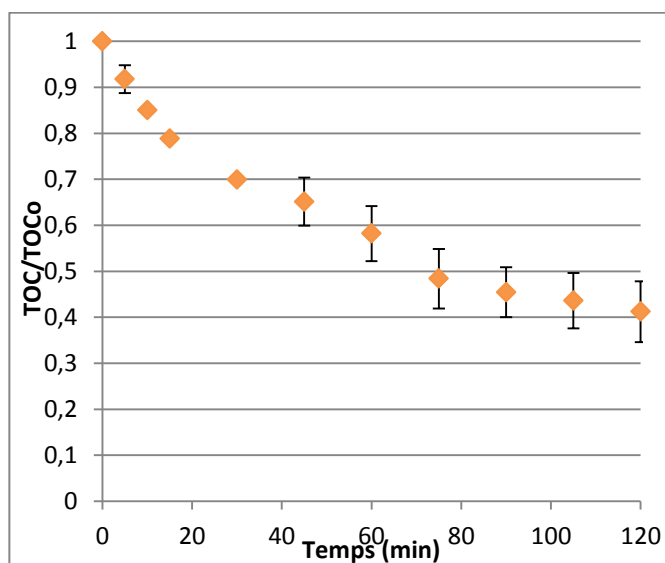
- Experiment 60 10 567



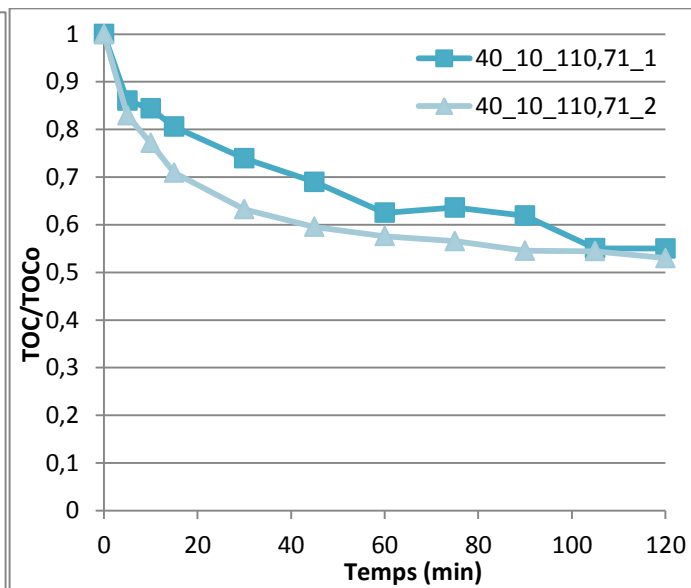
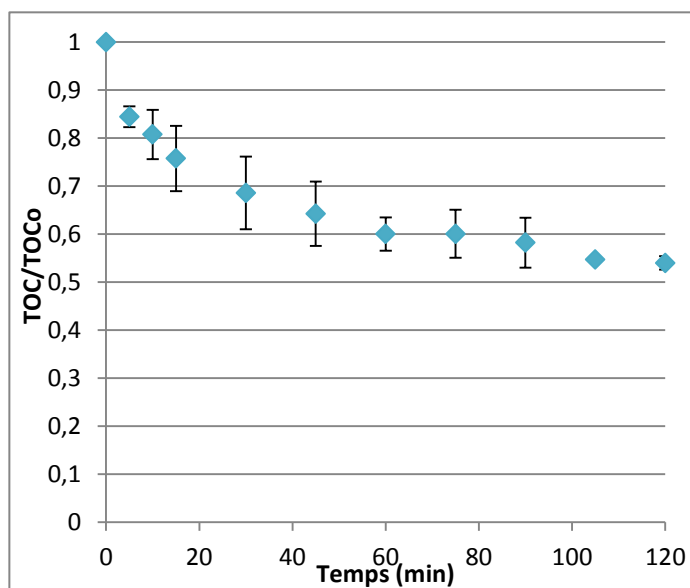
- Experiment 11,71 10 378



- Experiment 68,28 10 378

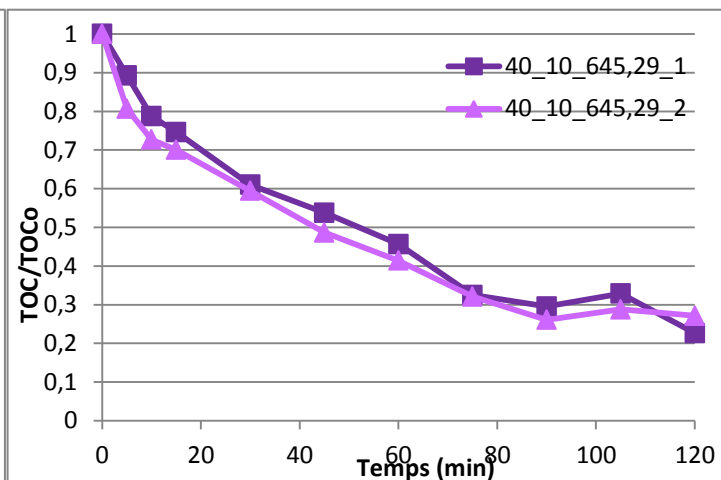
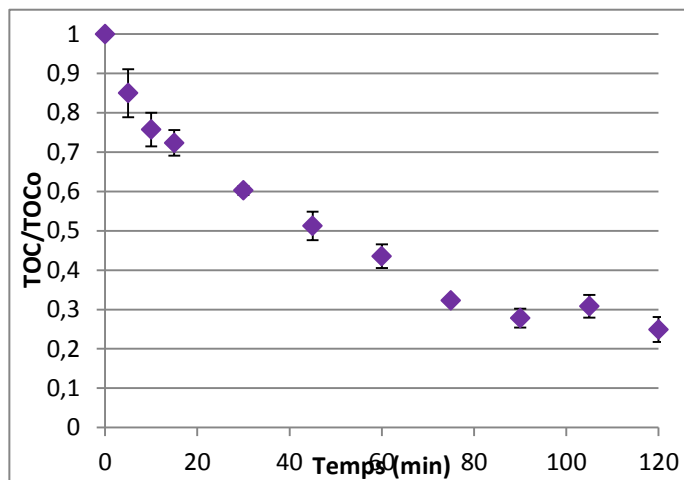


- Experiment 40 10 110,71





- Experiment 40\_10\_645,29



#### 4. Fitxes de seguretat

##### 4.1 Paracetamol

## Ficha de Datos de Seguridad

**ACOFARMA**

Conforme al Reglamento (CE)Nº 1907/2006 (REACH)

### 1.- Identificación de la sustancia o del preparado y de la sociedad o empresa

*Identificación de la sustancia o del preparado*

**Denominación:** Paracetamol Ph.Eur.

*Identificación de la sociedad o empresa:* Acofarma Distribución S.A.  
Llobregat, 20  
08223-Terrassa. España.  
Tel: 93 736 00 88 / Fax: 93 785 93 62

Teléfono de urgencias: Instituto Nacional de Toxicología. Madrid. Tel: 91 562 04 20

### 2.- Identificación de los peligros

#### Clasificación de la sustancia o mezcla

De acuerdo al Reglamento (EC) No 1272/2008

Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4)

Irritación cutánea (Categoría 2)

Irritación ocular (Categoría 2)

Toxicidad específica en determinados órganos (stot) - exposición única (Categoría 3)

De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE, y sus enmiendas.

Nocivo por ingestión. Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.

#### Elementos de la etiqueta



Pictograma

Palabra de advertencia Atención

Indicación(es) de peligro

H302 Nocivo en caso de ingestión.

H315 Provoca irritación cutánea.

H319 Provoca irritación ocular grave.

H335 Puede irritar las vías respiratorias.

Declaración(es) de prudencia

P261 Evitar respirar el polvo/el humo/el gas/la niebla/los vapores/el aerosol.

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.

Símbolo(s) de peligrosidad

Xn Nocivo

Frase(s) - R

R22

Nocivo por ingestión.

R36/37/38

Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.

Frase(s) - S

S26

En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico.

S36

Úsese indumentaria protectora adecuada.

Otros Peligros - ninguno(a)

### 3.- Composición/información sobre los componentes

CAS-Nº: 103-90-2 EINECS.: 03-157-5

PM: 151.17

Fórmula molecular:  $C_8H_9NO_2$

**4.- Primeros auxilios**

Tras inhalación: Aire fresco.

Tras contacto con la piel: Aclarar con abundante agua. Eliminar la ropa contaminada.

Tras contacto con los ojos: Aclarar con abundante agua, manteniendo abiertos los párpados.

Tras ingestión: Beber abundante agua, provocar vómito. Llamar al médico en caso de que persista el malestar.

**5.- Medidas de lucha contra incendios**

*Medios de extinción adecuados:*

CO<sub>2</sub>, espuma, polvo.

*Riesgos especiales:*

Combustible. En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

En caso de incendio pueden producirse: óxidos de nitrógeno.

*Referencias adicionales:*

Evitar la penetración del agua de extinción en acuíferos superficiales o subterráneos.

**6.- Medidas a tomar en caso de vertido accidental**

*Procedimientos de recogida/limpieza:*

Recoger en seco y proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar después. Evitar la formación de polvo.

**7.- Manipulación y almacenamiento**

*Manipulación:*

Sin otras exigencias.

*Almacenamiento:*

A +15°C y +25°C. Bien cerrado. Sin más exigencias.

**8.- Controles de exposición/protección personal**

*Protección personal:*

Protección respiratoria: Precisa en presencia de polvo.

Protección de las manos: Precisa.

Protección de los ojos: Precisa.

*Medidas de higiene particulares:*

Sustituir la ropa contaminada. Se recomienda protección preventiva de la piel. Lavarse las manos al finalizar el trabajo.

**9.- Propiedades físicas y químicas**

Estado físico: Polvo finamente cristalizado.

Color: Blanco

Olor:

Valor pH (20°C) 5.3-6.5 (solución saturada)

Punto de fusión		169-171 °C
Punto de ebullición		no disponible
Punto de ignición		no disponible
Punto de destello		no disponible
Límites de explosión	bajo	no disponible
	alto	no disponible
Densidad	(20°C)	no disponible
Densidad aparente		650 kg/m <sup>3</sup>
Solubilidad en		
agua	(20°C)	14 g/l
etanol	(20°C)	soluble
acetona	(20°C)	soluble

#### 10.- Estabilidad y reactividad

*Materias a evitar:*

Oxidantes, ácidos, soluciones de hidróxidos alcalinos.

*Productos de descomposición peligrosos:*

Información no disponible.

*Información complementaria:*

Sensible a la luz (decoloración).

#### 11.- Información toxicológica

*Toxicidad aguda:*

DL<sub>50</sub> (oral, rata): 2400 mg/kg

*Informaciones adicionales sobre toxicidad:*

Tras contacto con la piel: Irritaciones.

Tras contacto con los ojos: Irritaciones.

Tras inhalación: Irritaciones.

*Información complementaria:*

No pueden excluirse otras características peligrosas.

El producto debe manejarse con las precauciones apropiadas para los productos químicos.

#### 12.- Informaciones ecológicas

*Efectos ecotóxicos:*

No disponemos de datos cuantitativos sobre los efectos ecológicos del producto.

*Otras observaciones ecológicas:*

Manteniéndolas condiciones adecuadas de manejo no deben esperarse problemas ecológicos.

#### 13.- Consideraciones relativas a la eliminación

*Producto:*

En la Unión Europea no están regulados, por el momento, los criterios homogéneos para la eliminación de residuos químicos. Aquellos productos químicos, que resultan como residuos del uso cotidiano de los mismos, tienen en general, el carácter de residuos especiales. Su eliminación en los países comunitarios se encuentra regulada por leyes y disposiciones locales.

Le rogamos contacte con aquella entidad adecuada en cada caso (Administración Pública, o bien Empresa especializada en la eliminación de residuos), para informarse sobre su caso particular.

*Envases:*

Su eliminación debe realizarse de acuerdo con las disposiciones oficiales. Para los embalajes contaminados deben adoptarse las mismas medidas que para el producto contaminante. Los embalajes no contaminados se tratarán como residuos domésticos o como material reciclable.

**14.- Información relativa al transporte**

No sometido a las normas de transporte.

**15.- Información Reglamentaria**

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

**16.- Otras informaciones**

**Texto de códigos H y frases R mencionadas en la sección 2**

Fecha de emisión: 22-11-99

Fecha de edición 2ª: 30-11-10

Los datos suministrados en esta ficha de seguridad se basan en nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de este producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.

## 4.2 Peròxid d'hidrogen



### Ficha de Datos de Seguridad

Según Reglamento (CE) 1907/2006

1907/2006

**132352 Amonio meta-Vanadato** (Reag, USP, Ph, Eur,) PA-ACS

#### Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa

##### 1,1 Identificación de la sustancia o del preparado

Denominación:

Amonio meta-Vanadato

##### 1,2 Uso de la sustancia o preparado:

Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina,

##### 1,3 Identificación de la sociedad o empresa:

PANREAC	QUIMICA,	S,A,U,
C/Garraf,		2
Polígono	Pla	de
E-08211	Castellar	la
(Barcelona)		del
		Bruguera
		Vallès
		España
Tel, (+34) 937 489 400		(+34) 937 489 400
e-mail:		product,safety@panreac.com
Urgencias:		
Número único de teléfono para llamadas de urgencia: 112 (UE)		
Tel,:(+34) 937 489 499		(+34) 937 489 499

---

#### Identificación de los peligros

Tóxico por ingestión, Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias,

---

#### Composición/Información de los componentes

Denominación: Amonio meta-Vanadato  
Fórmula:  $\text{NH}_4\text{VO}_3$  M,=116,98 CAS [7803-55-6]  
Número CE (EINECS): 232-261-3

---

#### Primeros auxilios

4,1 Indicaciones generales:

En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito,

4,2 Inhalación:

Trasladar a la persona al aire libre, En caso de asfixia proceder a la respiración artificial,

4,3 Contacto con la piel:

Lavar abundantemente con agua, Quitarse las ropas contaminadas,

4,4 Ojos:

Lavar con agua abundante manteniendo los párpados abiertos, Pedir atención médica,

4,5 Ingestión:

Beber agua abundante, Provocar el vómito, Pedir atención médica,

En caso de asfixia proceder a la respiración artificial, Pedir inmediatamente atención médica,

---

#### Medidas de lucha contra incendio

5,1 Medios de extinción adecuados:

Los apropiados al entorno,

5,2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:

5,3 Riesgos especiales:

Incombustible, En caso de incendio pueden formarse vapores tóxicos,

5,4 Equipos de protección:

-----

---

Medidas a tomar en caso de vertido accidental

6,1 Precauciones individuales:

-----

6,2 Precauciones para la protección del medio ambiente:

No permitir el paso al sistema de desagües, Evitar la contaminación del suelo, aguas y desagües,

6,3 Métodos de recogida/limpieza:

Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes, Limpiar los restos con agua abundante,

Manipulación y almacenamiento

7,1 Manipulación:

Sin indicaciones particulares,

7,2 Almacenamiento:

Recipientes bien cerrados, Ambiente seco, En local bien ventilado, Temperatura ambiente,

---

Controles de exposición/protección personal

8,1 Medidas técnicas de protección:

-----

8,2 Control límite de exposición:



8,3 Protección respiratoria:

En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado,

8,4 Protección de las manos:

Usar guantes apropiados

8,5 Protección de los ojos:

Usar gafas apropiadas,

8,6 Medidas de higiene particulares:

Quitarse las ropas contaminadas, Lavarse las manos antes de las pausas y al finalizar el trabajo,

8,7 Controles de la exposición del medio ambiente:

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente,

El proveedor de los medios de protección debe especificar el tipo de protección que debe usarse para la manipulación del producto, indicando el tipo de material y, cuando proceda, el tiempo de penetración de dicho material, en relación con la cantidad y la duración de la exposición,

---

Propiedades físicas y químicas

Aspecto:

Polvo cristalino blanco o ligeramente amarillento,

Olor:

Característico,

pH                      x6,5                      (5                      g/l  
Densidad                      (20/4):                      2,33  
Solubilidad: 6,2 g/l en agua a 15°C,

## Estabilidad y reactividad

### 10,1 Condiciones que deben evitarse:

Temperaturas elevadas,

### 10,2 Materias que deben evitarse:

-----

### 10,3 Productos de descomposición peligrosos:

Amoniaco,

### 10,4 Información complementaria:

-----

---

## Información toxicológica

### 11,1 Toxicidad aguda:

DL<sub>50</sub> oral rata: 160 mg/kg  
DL<sub>50</sub> intraperitoneal rata: 18 mg/kg

### 11,2 Efectos peligrosos para la salud:

Por inhalación: Irritaciones en piel, ojos y mucosas, Provoca tos, dificultades respiratorias,  
Por absorción: alteraciones sanguíneas, trastornos cardiovasculares, pérdida de peso,

---

## Información Ecológica

### 12,1 Movilidad :

-----

### 12,2 Ecotoxicidad :

12,2,1 - Test EC<sub>50</sub> (mg/l) :

Peces (NH<sub>4</sub>) = 0,3 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico,  
Bacterias (Photobacterium phosphoreum) (NH<sub>4</sub>) = 2 mg/l ;  
Clasificación : Extremadamente tóxico,  
Peces (V) = 4,8 - 30 mg/l ; Clasificación : Extremadamente tóxico,  
12,2,2 - Medio receptor :  
Riesgo para el medio acuático = Alto  
Riesgo para el medio terrestre = Medio  
12,2,3 - Observaciones :  
La ecotoxicidad se debe al ión amonio y al vanadio,

12,3 Degradabilidad :

12,3,1 - Test :-----  
12,3,2 - Clasificación sobre degradación biótica :  
DBO<sub>5</sub>/DQO Biodegradabilidad = -----  
12,3,3 - Degradación abiótica según pH : -----  
12,3,4 - Observaciones :  
-----

12,4 Acumulación :

12,4,1 - Test :  
-----  
12,4,2 - Bioacumulación :  
Riesgo = -----  
12,4,3 - Observaciones :  
-----

12,5 Otros posibles efectos sobre el medio natural :

No permitir su incorporación al suelo ni a acuíferos,

Consideraciones sobre la eliminación

13,1 Sustancia o preparado:

En la Unión Europea no están establecidas pautas homogéneas para la eliminación de residuos químicos, los cuales tienen carácter de residuos especiales, quedando sujetos su tratamiento y eliminación a los reglamentos internos de cada país, Por tanto, en cada caso, procede contactar con la autoridad competente, o bien con los gestores legalmente autorizados para la eliminación de residuos,

---

2001/573/CE: Decisión del Consejo, de 23 de julio de 2001, por la que se modifica la Decisión 2000/532/CE de la Comisión en lo relativo a la lista de residuos, Directiva 91/156/CEE del Consejo de 18 de marzo de 1991 por la que se modifica la Directiva 75/442/CEE relativa a los residuos,

En España: Ley 10/1998, de 21 de abril, de Residuos, Publicada en BOE 22/04/98, ORDEN MAM/304/2002, de 8 de febrero, por la que se publican las operaciones de valorización y eliminación de residuos y la lista europea de residuos, Publicada en BOE 19/02/02,

### 13,2 Envases contaminados:

Los envases y embalajes contaminados de sustancias o preparados peligrosos, tendrán el mismo tratamiento que los propios productos contenidos, Directiva 94/62/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 20 de diciembre de 1994, relativa a los envases y residuos de envases,

En España: Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases, Publicada en BOE 25/04/97, Real Decreto 782/1998, de 30 de abril, por el que se aprueba el Reglamento para el desarrollo y ejecución de la Ley 11/1997, de 24 de abril, de Envases y Residuos de Envases, Publicado en BOE 01/05/98,

### Información relativa al transporte

Terrestre (ADR):

Denominación técnica: METAVANADATO AMÓNICO

ONU 2859 Clase: 6,1 Grupo de embalaje: II (D/E)

Marítimo (IMDG):

Denominación técnica: METAVANADATO AMÓNICO

ONU 2859 Clase: 6,1 Grupo de embalaje: II

Aéreo (ICAO-IATA):

Denominación técnica: Metavanadato amónico

ONU 2859 Clase: 6,1 Grupo de embalaje: II

Instrucciones de embalaje: CAO 615 PAX 613

---

### Información reglamentaria

Etiquetado según REACH



Símbolos:

Indicaciones de peligro: Tóxico

Frases R: 25-36/37/38 Tóxico por ingestión, Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias,

Frases S: 37-45 Usense guantes adecuados, En caso de accidente o malestar, acuda inmediatamente al médico (si es posible, muéstrele la etiqueta),

---

Otras informaciones

Número y fecha de la revisión: 0 14,05,09

Los datos consignados en la presente Ficha de Datos de Seguridad, están basados en nuestros actuales conocimientos, teniendo como único objeto informar sobre aspectos de seguridad y no garantizándose las propiedades y características en ella indicadas,

#### 4.3 Sulfat de ferro (II)

### 1. Identificación de la sustancia/preparado y de la sociedad o empresa

#### 1.1 Identificación de la sustancia o del preparado

Hierro(II) Sulfato 7-hidrato

#### 1.2 Uso de la sustancia o preparado:

Para usos de laboratorio, análisis, investigación y química fina.

#### 1.3 Identificación de la sociedad o empresa:

PANREAC QUIMICA, S.A.U.  
C/Garraf, 2  
Polígono Pla de la Bruguera  
E-08211 Castellar del Vallès  
(Barcelona) España

---

### 2. Identificación de los peligros

Nocivo por ingestión.

---

### 3. Composición/Información de los componentes

Denominación: Hierro(II) Sulfato 7-hidrato  
Fórmula:  $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  M.=278,02 CAS [7782-63-0]  
Número CE (EINECS): 231-753-5

---

### 4. Primeros auxilios

#### 4.1 Indicaciones generales:

En caso de pérdida del conocimiento nunca dar a beber ni provocar el vómito.

#### 4.2 Inhalación:

Ir al aire fresco.

#### 4.3 Contacto con la piel:

Lavar abundantemente con agua. Quitarse las ropas contaminadas.

#### 4.4 Ojos:

Lavar con agua abundante manteniendo los párpados abiertos.



#### **4.5 Ingestión:**

Beber agua abundante. Beber leche sola o mezclada con huevos crudos. Provocar el vómito. Pedir atención médica.

---

### **5. Medidas de lucha contra incendio**

#### **5.1 Medios de extinción adecuados:**

Los apropiados al entorno.

#### **5.2 Medios de extinción que NO deben utilizarse:**

-----

#### **5.3 Riesgos especiales:**

Incombustible. En caso de incendio pueden formarse vapores tóxicos de SOx.

#### **5.4 Equipos de protección:**

-----

---

### **6. Medidas a tomar en caso de vertido accidental**

#### **6.1 Precauciones individuales:**

Evitar el contacto con la piel, los ojos y la ropa.

#### **6.2 Precauciones para la protección del medio ambiente:**

No permitir el paso al sistema de desagües. Evitar la contaminación del suelo, aguas y desagües.

#### **6.3 Métodos de recogida/limpieza:**

Recoger en seco y depositar en contenedores de residuos para su posterior eliminación de acuerdo con las normativas vigentes.  
Limpiar los restos con agua abundante.

---

### **7. Manipulación y almacenamiento**

#### **7.1 Manipulación:**

Sin indicaciones particulares.

#### **7.2 Almacenamiento:**

Recipientes bien cerrados. Ambiente seco. En local bien ventilado. Temperatura ambiente.

## **8. Controles de exposición/protección personal**

### **8.1 Medidas técnicas de protección:**

-----

### **8.2 Control límite de exposición:**

-----

### **8.3 Protección respiratoria:**

En caso de formarse polvo, usar equipo respiratorio adecuado.

### **8.4 Protección de las manos:**

Usar guantes apropiados

### **8.5 Protección de los ojos:**

Usar gafas apropiadas.

### **8.6 Medidas de higiene particulares:**

Quitarse las ropas contaminadas. Lavarse las manos antes de las pausas y al finalizar el trabajo.

### **8.7 Controles de la exposición del medio ambiente:**

Cumplir con la legislación local vigente sobre protección del medio ambiente.

---

## **9. Propiedades físicas y químicas**

Aspecto: Sólido verde

Olor: Inodoro

pH 3-4

Punto de fusión : 64°C

Densidad (20/4): 1,89

Solubilidad: 400 g/l en agua a 20°C

---

## **11. Información toxicológica**

### **11.1 Toxicidad aguda:**

DL<sub>50</sub> oral ratón: 1520 mg/kg



DL<sub>50</sub> intraperitoneal ratón: 245 mg/kg

DLLo oral conejo: 2778 mg/kg

DLLo oral rata: 1389 mg/kg



#### 4.4 Vanadat amònic

 Ficha de Seguridad Química	
<b>AMONIO META-VANADATO</b>	
<b>DESCRIPCIÓN</b>	
Sinónimos:	: Meta-Vanadato de Amonio - Metavanadato de Amonio - Amonio Vanadato (V) - Acido Vanádico, Sal de Amonio.
Formula Química:	: $\text{NH}_4\text{VO}_3$
Concentración:	: 99.0%
Peso molecular:	: 116.98
Grupo Químico:	: Compuesto de Amonio inorgánico - Sal de Amonio Inorgánica.
Número CAS:	: 7803-55-6
Número NU:	: 2859
Código Winkler:	: AM-0362
<b>PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS</b>	
Estado Físico:	: Sólido.
Apariencia:	: Polvos cristalinos blancos a ligeramente amarillos.
Olor:	: Sin olor.
pH:	: No reportado.
Temperatura de Ebullición:	: No reportado.
Temperatura de Fusión:	: 130°C (se descompone).
Densidad (Agua):	: 2.326 kg/L a 20°C
Presión de Vapor:	: No reportado.
Densidad de Vapor (Aire):	: 4.0
Solubilidad:	: Baja solubilidad en Agua (0.48 g por 100 ml de Agua a 20°C).
<b>IDENTIFICACION DE RIESGOS</b>	
Riesgo Principal:	: Tóxico
Riesgos Secundarios:	: Irritante y Reactivo leve
Código Winkler:	: <div style="display: flex; align-items: center; gap: 10px;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; text-align: center;">3 <small>oxid</small></div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; text-align: center;">0 <small>irritante</small></div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; text-align: center;">1 <small>reactivo</small></div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; text-align: center;">1 <small>corrosivo</small></div> <div style="font-size: 0.8em;">                         Clasificación de riesgos:                          0 = No reportado                          1 = Leve                          2 = Moderado                          3 = Grave                          4 = Extremo                     </div> </div>
Rótulo de Transporte:	: <div style="display: flex; align-items: center; justify-content: space-between;">  <div> <b>Norma NFPA</b>                           3 - 0 - 0                     </div> </div>
Clase:	: 6
Grupo:	: II
Division:	: 6.1

### RIESGOS PARA LA SALUD

<b>EFFECTOS DE SOBREEXPOSICION</b>	
<b>Inhalación</b>	: Irritaciones en las vías respiratorias. Tóxico.
<b>Contacto con La Piel</b>	: Irritaciones.
<b>Contacto con los Ojos</b>	: Irritaciones.
<b>Ingestión</b>	: Irritaciones.
<b>Otros Efectos</b>	
<b>Cancerígeno</b>	: No hay evidencias.
<b>Mutageno</b>	: No hay evidencias.
<b>Teratogeno</b>	: No hay evidencias.
<b>Otro: Efectos</b>	: No hay evidencias.

### RIESGO DE INCENDIO

<b>Condición de Inflamabilidad</b>	: No combustible.
<b>Temperatura de Inflamación</b>	: No aplicable.
<b>Temperatura de Autoignición</b>	: No aplicable.
<b>Límite de Inflamabilidad</b>	: No aplicable.
<b>Productos de Combustión</b>	: Amoníaco y Oxidos de Vanadio.
<b>Medios de Extinción</b>	: En general, uso de extintores de Polvo Químico Seco, Espuma Química y/o Anhídrido Carbónico, de acuerdo a características del fuego circundante. Aplicar Agua sólo en forma de neblina.

### RIESGO DE REACTIVIDAD

<b>Estabilidad Química</b>	: Normalmente estable.
<b>Incompatibilidades</b>	: No reportados.
<b>Peligro de Polimerización</b>	: No ocurre.
<b>Productos Peligrosos en Descomposición</b>	: Amoníaco y Oxidos de Vanadio.
<b>Condiciones a Evitar</b>	: Altas temperaturas (se descompone).

### CONTROL DE EXPOSICION

<b>Medidas de Control</b>	:	Trabajar en un lugar con buena ventilación, de preferencia forzada. Usar cabinas o campanas de laboratorio con extracción forzada, dado que el producto es tóxico. Aplicar procedimientos de trabajo seguro. Capacitar respecto a los riesgos químicos y su prevención. Contar con ficha de seguridad química del producto y conocer su contenido. Mantener los envases con sus respectivas etiquetas. Respetar prohibiciones de no fumar, comer y beber bebidas en el lugar de trabajo. Utilizar elementos de protección personal asignados.
<b>Límite Permissible Ponderado</b>	:	8 mg/m <sup>3</sup> (para Amonio meta-Vanadato, como Polvos no Clasificados Decreto N°594, Ministerio de Salud) 0.04 mg/m <sup>3</sup> (Vanadio, como Polvos Respirables y Humos, expresado como V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> Decreto N°594, Ministerio de Salud)
<b>Límite Permissible Absoluto</b>	:	40 mg/m <sup>3</sup> (para Amonio meta-Vanadato, como Polvos no Clasificados Decreto N°594, Ministerio de Salud) 0.20 mg/m <sup>3</sup> (Vanadio, como Polvos Respirables y Humos, expresado como V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> Decreto N°594, Ministerio de Salud)
<b>Límite Permissible temporal</b>	:	No regulado.
<b>Otros límites</b>	:	No reportados.

### EQUIPOS DE PROTECCION PERSONAL

### EQUIPOS DE PROTECCION PERSONAL

<b>Ropa de Trabajo</b>	:	Utilizar indumentaria de trabajo resistente al producto tóxico.
<b>Protección Respiratoria</b>	:	Aplicación de protección respiratoria sólo en caso de sobrepasarse alguno de los límites permisibles normados. Debe ser específica para partículas sólidas. En caso de presencia de altas concentraciones ambientales, existencia de cantidades desconocidas o situaciones de emergencias, se deben utilizar equipos de respiración autónomos o de suministro de aire, ambos de presión positiva.
<b>Guantes de Protección</b>	:	Utilización de guantes de Goma Natural u otros de características impermeables y resistentes al químico tóxico.
<b>Lentes Protectores</b>	:	Uso de lentes de seguridad adecuados contra proyecciones del químico.
<b>Calzado de seguridad</b>	:	Utilizar calzado cerrado, no absorbente, con resistencia química y de planta baja.

### MEDIDAS DE PRIMEROS AUXILIOS

<b>EN CASO DE:</b>	
<b>Inhalación</b>	: Trasladar a la persona donde exista aire fresco. En caso de paro respiratorio, emplear método de reanimación cardiopulmonar. Si respira dificultosamente se debe suministrar Oxígeno. Conseguir asistencia médica de inmediato.
<b>Contacto con la piel</b>	: Lavar con abundante Agua, a lo menos de 5 a 10 minutos. Como medida general, utilizar una ducha de emergencia si es necesario. Sacarse la ropa contaminada y luego lavarla o desecharla. De mantenerse la irritación, recurrir a una asistencia médica.

## Tratamiento de contaminantes emergentes con procesos de oxidación avanzada

<b>Contacto con los Ojos</b>	:	Lavar con abundante y rápida Agua en un lavadero de ojos, entre 5 y 10 minutos como mínimo, separando los párpados. De persistir la irritación, derivar a un centro de atención médica.
<b>Ingestión</b>	:	Lavar la boca con bastante Agua y dar a beber Agua. Control del shock, manteniendo a la persona abrigada. Inducir al vómito, sólo si la persona está consciente. Enviar a un centro de atención médica rápidamente.
<b>Nota:</b> Si la lesión sufrida por una persona tiene relación laboral y está cubierta por la Ley N°16744 de Accidentes del Trabajo y Enfermedades Profesionales, podrá ser atendida según proceda, por el Servicio Médico asociado a la Asociación Chilena de Seguridad, Mutual de Seguridad C.CH.C., Instituto de Seguridad del Trabajo, Instituto de Normalización Previsional o por la Administración Delegada correspondiente.		

### ALMACENAMIENTO

<b>Area de Almacenamiento</b>	:	Zona de almacenaje de reactivos y soluciones químicas con riesgo para la salud. Almacenamiento en bodegas y/o cabinas, diseñadas para contener sustancias tóxicas con seguridad. Lugar frío, seco y con buena ventilación. Acceso controlado y señalización del riesgo.
<b>Código de almacenaje Winkler</b>	:	Azul
<b>Precauciones Especiales</b>	:	Mantener alejado de condiciones incompatibles. Proteger contra el daño físico. Tener los envases cerrados y debidamente etiquetados.

### MEDIDAS PARA EL CONTROL DE DERRAMES O FUGAS

### MEDIDAS PARA EL CONTROL DE DERRAMES O FUGAS

<b>PROCEDIMIENTO</b>
Contener el derrame o fuga. Ventilar y aislar el área crítica. Utilizar elementos de protección personal. Nivel de protección B o C. Recoger el producto a través de una alternativa segura. Disponer el producto recogido como residuo químico. Lavar la zona contaminada con Agua. Solicitar ayuda especializada si es necesaria. Aplicar Guía de Respuesta a Emergencia Americana (Guía N°154).


### DISPOSICION DE RESIDUOS QUIMICOS

En general, los residuos químicos se pueden eliminar a través de una alternativa segura, una vez que se acondicionen de forma tal de ser inocuos para el medio ambiente.
Possibilidad: - Se deben disponer los desechos directamente en un vertedero autorizado para contener sustancias tóxicas.
Es importante considerar para la eliminación de residuos, que se realice conforme a lo que disponga la autoridad competente respectiva, solicitándose previamente la autorización correspondiente.



## 4.5 Hidròxid de sodi

### Fichas Internacionales de Seguridad Química

HIDRÓXIDO DE SODIO		ICSC: 0360 Mayo 2010	
CAS: NU: CE Índice Anexo I: CE / EINECS:	1310-73-2 1823 011-002-00-6 215-185-5	Sosa caústica Hidrato de sodio Sosa NaOH Masa molecular: 40.0	
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	No combustible. El contacto con la humedad o con el agua, puede generar calor suficiente para provocar la ignición de materiales combustibles.	NO poner en contacto con el agua.	En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.
EXPLOSIÓN	Riesgo de incendio y explosión en contacto con: (ver Peligros Químicos).	NO poner en contacto con materiales incompatibles. (Ver Peligros Químicos).	
EXPOSICIÓN		¡EVITAR LA DISPERSIÓN DEL POLVO! ¡EVITAR TODO CONTACTO!	¡CONSULTAR AL MÉDICO EN TODOS LOS CASOS!
Inhalación	Tos. Dolor de garganta. Sensación de quemazón. Jadeo.	Extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Enrojecimiento. Dolor. Graves quemaduras cutáneas. Ampollas.	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse durante 15 minutos como mínimo. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Visión borrosa. Quemaduras graves.	Pantalla facial o protección ocular combinada con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Quemaduras en la boca y la garganta. Sensación de quemazón en la garganta y el pecho. Náuseas. Vómitos. Shock o colapso.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Dar a beber un vaso pequeño de agua, pocos minutos después de la ingestión. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.

DERRAMES Y FUGAS	ENVASADO Y ETIQUETADO
Protección personal: traje de protección química, incluyendo equipo autónomo de respiración. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente. Barrer la sustancia derramada e introducirla en un recipiente de plástico. Recoger cuidadosamente el residuo y trasladarlo a continuación a un lugar seguro.	No transportar con alimentos y piensos. Clasificación UE Símbolo: C R: 35 S: (1/2)-(26-37/39-45) Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 8 Grupo de Envasado NU: II Clasificación GHS Peligro Nocivo en caso de ingestión. Provoca graves quemaduras en la piel y lesiones oculares. Puede provocar irritación respiratoria.
RESPUESTA DE EMERGENCIA	ALMACENAMIENTO
Código NFPA: H3; F0; R1	Separado de alimentos y piensos, ácidos fuertes y metales. Almacenar en el recipiente original. Mantener en lugar seco. Bien cerrado. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.
<p>Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2010</p> <div>  </div>	

### Fichas Internacionales de Seguridad Quimica

HIDRÓXIDO DE SODIO		ICSC: 0360
DATOS IMPORTANTES		
<b>ESTADO FÍSICO; ASPECTO</b> Sólido blanco e higroscópico, en diversas formas		<b>VÍAS DE EXPOSICIÓN</b> Efectos locales graves
<b>PELIGROS QUÍMICOS</b> La disolución en agua es una base fuerte que reacciona violentamente con ácidos y es corrosiva con metales tales como: aluminio, estaño, plomo y cinc, formando gas combustible (hidrógeno - ver FISQ:0001). Reacciona con sales de amonio produciendo amoníaco, originando peligro de incendio. El contacto con la humedad o con el agua genera calor. (Ver Notas).		<b>RIESGO DE INHALACIÓN</b> Puede alcanzarse rápidamente una concentración nociva de partículas suspendidas en el aire cuando se dispersa.
<b>LÍMITES DE EXPOSICIÓN</b> TLV: 2 mg/m <sup>3</sup> (Valor techo) (ACGIH 2010). MAK: 1lb (no establecido pero hay datos disponibles) (DFG 2009).		<b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN</b> La sustancia es corrosiva para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. Corrosivo por ingestión.
		<b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA</b> El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis.
PROPIEDADES FÍSICAS		
Punto de ebullición: 1388°C Punto de fusión: 318°C Densidad: 2.1 g/cm <sup>3</sup>  Solubilidad en agua, g/100 ml a 20°C: 109 (muy elevada).		
DATOS AMBIENTALES		
Esta sustancia puede ser peligrosa para el medio ambiente. Debe prestarse atención especial a los organismos acuáticos.		
NOTAS		
El valor límite de exposición laboral aplicable no debe ser superado en ningún momento por la exposición en el trabajo. NO verter NUNCA agua sobre esta sustancia; cuando se deba disolver o diluir, añadirla al agua siempre lentamente. Otro nº NU: NU1824 Disolución de hidróxido de sodio, clasificación de peligro 8, grupo de envasado II-III.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
Límites de exposición profesional (INSHT 2011):  VLA-EC: 2 mg/m <sup>3</sup>		

## 4.6 Àcid clorhídric

### CLORURO DE HIDROGENO

ICSC: 0163







**CLORURO DE HIDROGENO**  
 Ácido clorhídrico, anhidro  
 Cloruro de hidrógeno, anhidro  
 HCl  
 Masa molecular: 36.5




Nº CAS 7647-01-0  
 Nº RTECS MW4025000  
 Nº ICSC 0163  
 Nº NU 1050  
 Nº CE 017-002-00-2

TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
<b>INCENDIO</b>	No combustible.		En caso de incendio en el entorno: están permitidos todos los agentes extintores.
<b>EXPLOSION</b>			En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua pero NO en contacto directo con agua.
<b>EXPOSICION</b>		¡EVITAR TODO CONTACTO!	¡CONSULTAR AL MEDICO EN TODOS LOS CASOS!
<b>• INHALACION</b>	Corrosivo. Sensación de quemazón, tos, dificultad respiratoria, jadeo, dolor de garganta. (Síntomas no inmediatos: véanse Notas).	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semincorporado, respiración artificial si estuviera indicada y proporcionar asistencia médica.
<b>• PIEL</b>	Corrosivo. Quemaduras cutáneas graves, dolor.	Guantes protectores y traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar la piel con agua abundante o ducharse y proporcionar asistencia médica.
<b>• OJOS</b>	Corrosivo. Dolor, visión borrosa, quemaduras profundas graves.	Gafas ajustadas de seguridad, pantalla facial o protección ocular combinada con la protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad) y proporcionar asistencia médica.
<b>• INGESTION</b>			

**DERRAMAS Y FUGAS**

**ALMACENAMIENTO**

**ENVASADO Y ETIQUETADO**

DERRAMAS Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO
Evacuar la zona de peligro. Consultar a un experto. Ventilar. Eliminar gas con agua pulverizada. (Protección personal adicional: traje de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración).	Separado de sustancias combustibles y reductoras, oxidantes fuertes, bases fuertes, metales. Mantener en lugar bien ventilado.	<p>CE:                      símbolo C                      símbolo T                      R: 23-35                      S: (1/2)-9-26-36/37/39-45                      Clasificación de Peligros NU: 2.3                      Riesgos Subsidiarios NU: 8</p> <div style="display: flex; justify-content: center; align-items: center;">   </div>

**VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE**

ICSC: 0163

Preparado en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © DCE, IPCS, 1994



<b>CLORURO DE HIDRÓGENO</b>	<b>ICSC: 0163</b>
-----------------------------	-------------------

<b>DATOS IMPORTANTES</b>	
<b>ESTADO FÍSICO; ASPECTO:</b> Gas licuado comprimido incoloro, de olor acre.	<b>VÍAS DE EXPOSICIÓN:</b> La sustancia se puede absorber por inhalación.
<b>PELIGROS FÍSICOS:</b> El gas es más denso que el aire	<b>RIESGO DE INHALACIÓN:</b> Al producirse una pérdida de gas se alcanza muy rápidamente una concentración nociva de éste en el aire.
<b>PELIGROS QUÍMICOS:</b> La disolución en agua es un ácido fuerte, reacciona violentamente con bases y es corrosiva. Reacciona violentamente con oxidantes formando gas tóxico de cloro (ver ICSC 0126). Ataca a muchos metales en presencia de agua formando gas inflamable/explosivo de hidrógeno (ver ICSC 0001).	<b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:</b> La evaporación rápida del líquido puede producir congelación. La sustancia es corrosiva para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La inhalación de altas concentraciones del gas puede originar neumonitis y edema pulmonar, dando lugar a síndrome de disfunción reactiva de las vías aéreas (RADs) (ver Notas). Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.
<b>LÍMITES DE EXPOSICIÓN:</b> TLV: 2 ppm (valor techo); A4 (ACGIH 2004). MAK: 2 ppm, 3 mg/m³, Categoría de limitación de pico: I(2), Riesgo para el embarazo: grupo C (DFG 2004).	<b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA:</b> La sustancia puede afectar al pulmón, dando lugar a bronquitis crónica. La sustancia puede causar erosiones dentales.
<b>PROPIEDADES FÍSICAS</b>	
Punto de ebullición: -85°C Punto de fusión: -114°C Densidad: 1.00045 g/l (gas) Solubilidad en agua, g/100 ml a 30°C: 67 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.3	Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 0.25
<b>DATOS AMBIENTALES</b>	

<b>NOTAS</b>	
El valor límite de exposición laboral aplicable no debe superarse en ningún momento de la exposición en el trabajo. Los síntomas del edema pulmonar no se ponen de manifiesto, a menudo, hasta pasadas algunas horas y se agravan por el esfuerzo físico. Reposo y vigilancia médica son, por ello, imprescindibles. Debe considerarse la inmediata administración de un aerosol adecuado por un médico o persona por él autorizada. NO pulverizar con agua sobre la botella que tenga un escape (para evitar la corrosión de la misma). Con el fin de evitar la fuga de gas en estado líquido, girar la botella que tenga un escape manteniendo arriba el punto de escape. Otros números NU: 2186 (líquido refrigerado) clase de peligro: 2.3; riesgo subsidiario: 8; 1789 (ácido clorhídrico) clase de peligro: 8, grupo de envasado II o III. Las disoluciones acuosas pueden contener hasta un 38% de cloruro de hidrógeno. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en abril de 2005; ver Límites de exposición, Respuesta de Emergencia.	
<b>INFORMACIÓN ADICIONAL</b>	
Límites de exposición profesional (INSHT 2011):  VLA-ED: 5 ppm; 7,6 mg/m³  VLA-EC: 10 ppm, 15 mg/m³  Notas: Agente químico que tiene establecido un valor límite indicativo por la UE.	
<b>Nota legal</b>	Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.
© IPCS, CE 2005	